NGC コンテナー

DU-08812-001_v03 | 2019 年 3 月

ユーザー ガイド

目次

第 1 章
Docker コンテナー

ここ数年、大規模なデータセンター アプリケーションの展開を簡略化するために、ソフトウェア コンテナーの使用が劇的に増加しています。コンテナーは、アプリケーションをライブラリなどの依存関係と共にカプセル化したものであり、仮想マシン全体のオーバーヘッドなしでアプリケーションとサービスの再現性と信頼性を実現できます。

Docker® Engine Utility for NVIDIA® GPU は nvidia-docker とも呼ばれ、Docker® を使用して複数のマシンに CPU ベースのアプリケーションを展開するのと同様に、Docker コンテナーを使用して GPU ベースのアプリケーションを移植できます。

このガイドでは、Docker® Engine Utility for NVIDIA® GPU を nvidia-docker と省略して記載します。

Docker コンテナー

Docker コンテナーは、Docker イメージのインスタンスです。Docker は、1 つのコンテナーに対して 1 つのアプリケーションまたはサービスを展開します。

Docker イメージ

Docker イメージは、nvidia-docker コンテナー内で実行されるソフトウェアです (ファイルシステムとパラメーターを含む)。

1.1. Docker コンテナーとは

Docker コンテナーは、Linux システムや同一ホスト上のインスタンスを問わず、アプリケーションの実行環境を常に維持できるように、アプリケーションにライブラリ、データ ファイル、環境変数をバンドルするメカニズムです。

VM は独自のカーネルを持ちますが、コンテナーはホストのシステム カーネルを使用します。そのため、コンテナーからのすべてのカーネル呼び出しは、ホスト システムのカーネルによって処理されます。DGX™ システムは、ディープラーニング フレームワークを展開するためのメカニズムとして Docker コンテナーを使用します。

Docker コンテナーは、Docker イメージ (英語) の実行中のインスタンスです。

1.2. コンテナーを使用するメリット

コンテナーを使用するメリットの 1 つは、実行するシステムごとではなく、アプリケーション、依存関係、環境変数をコンテナー イメージにまとめてインストールできることです。さらに、次のようなメリットもあります。

- アプリケーション、依存関係、環境変数をコンテナー イメージにインストールする際、実行するシステムごとではなく一度にインストールできる。
- 他の人がインストールしたライブラリと競合するリスクがない。
- コンテナーにより、ソフトウェアの依存関係が競合する可能性がある複数の異なるディープラーニング フレームワークを、同じサーバーで使用できる。
- アプリケーションをコンテナー内に構築すると、ソフトウェアをインストールすることなくサーバーなどのさまざまな場所で実行できる。
- 従来の高速計算アプリケーションをコンテナー化して、オンプレミスまたはクラウドの新しいシステムに展開できる。
- 固有の GPU リソースをコンテナーに割り当てることにより、システムを分離してパフォーマンスを高めることができる。
- 異なる環境でもアプリケーションを簡単に共有し、共同作業やテストができる。
- 特定のディープラーニング フレームワークの各インスタンスに 1 つ以上の固有の GPU を割り当て、同時に実行できる。
- コンテナー起動時に外部に公開される特定のポートにコンテナーポートをマッピングすることで、アプリケーション間のネットワークポートの競合を解決できる。

第 2 章
nvidia-docker イメージ

DGX-1 および NGC コンテナーは、nvcr.io と呼ばれる nvidia-docker リポジトリでホストされます。前のセクションで説明したように、これらのコンテナーはリポジトリから「プル」され、科学技術ワークロード、視覚化、ディープラーニングなどの GPU アクセラレーション アプリケーションに使用されます。

Docker イメージとは、開発者が構築するファイルシステムのことです。nvidia-docker イメージは、コンテナーのテンプレートとして、複数の層で構成されるソフトウェア スタックです。各階層は、スタック内の下の層に依存します。

Docker イメージからコンテナーが形成されます。コンテナーを作成するときは、書き込み可能な層をスタックの上に追加します。書き込み可能な層が追加された Docker イメージがコンテナーです。コンテナーとは、イメージの実行中のインスタンスのことを指します。コンテナーに対する変更や修正は、書き込み可能な層に対して加えられます。コンテナーは削除できますが、Docker イメージはそのまま残ります。

図 1 は、DGX-1 の nvidia-docker スタックです。nvidia-docker ツールがホスト OS と NVIDIA Driver の上にあることがわかります。このツールを使用して、nvidia-docker 層の上に NVIDIA コンテナーを作成して使用します。コンテナーには、アプリケーション、ディープラーニング SDK、CUDA® Toolkit™ が含まれます。nvidia-docker ツールによって、適切な NVIDIA ドライバーがマウントされます。

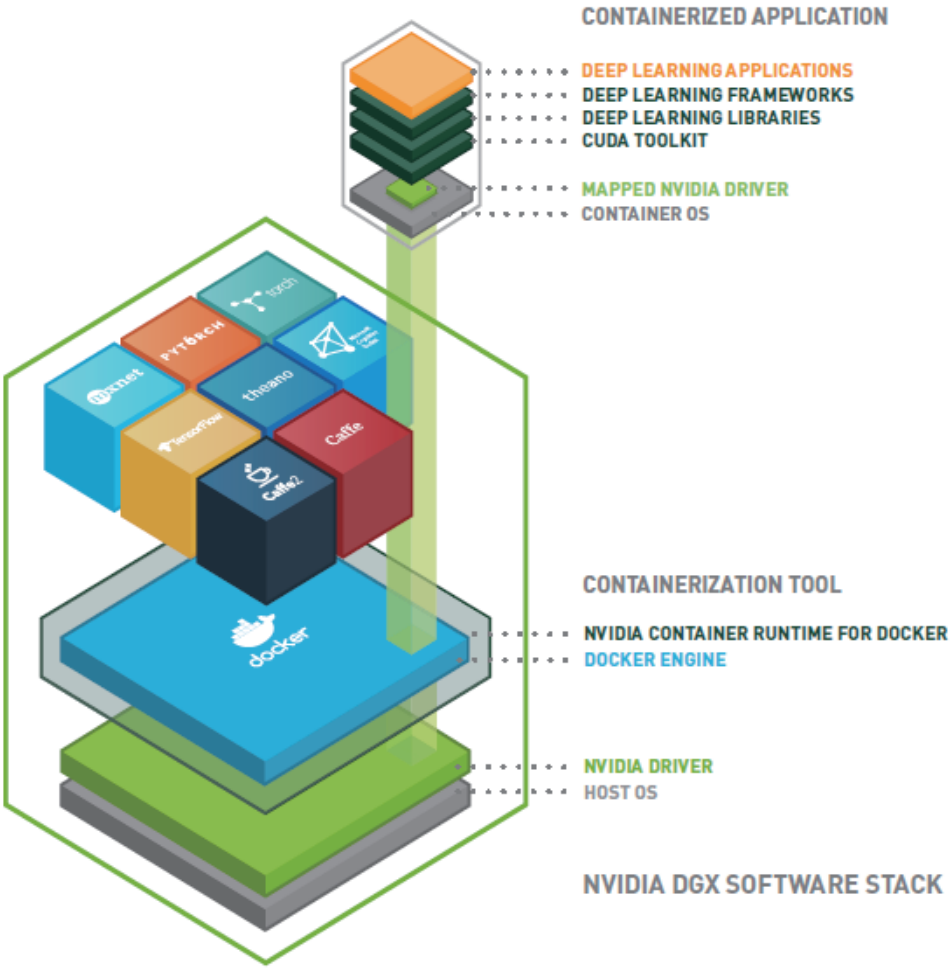

図 1: nvidia-docker は、起動時に NVIDIA ドライバーのユーザー モード コンポーネントと GPU を Docker コンテナーにマウントします。

2.1. nvidia-docker イメージのバージョン

nvidia-docker イメージの各リリースは、バージョン「タグ」で特定されます。単純なイメージの場合、このバージョン タグには通常、イメージの主要なソフトウェア パッケージのバージョンが含まれます。複数のソフトウェア パッケージまたはバージョンが含まれる複雑なイメージの場合は、コンテナー化された単一のソフトウェア構成を表す個別のバージョンが使用されることがあります。一般的なスキームでは、イメージ リリースの年と月でバージョンを示します。たとえば、17.01 は、2017 年 1 月にリリースされたという意味です。

イメージ名は、コロンで区切られた 2 つの部分で構成されます。前の部分はリポジトリ内のコンテナー名で、後の部分はコンテナーに関連付けられている「タグ」です。この 2 つの情報を図 2 に示します。これは、**`docker images`** コマンドを実行して出力できます。

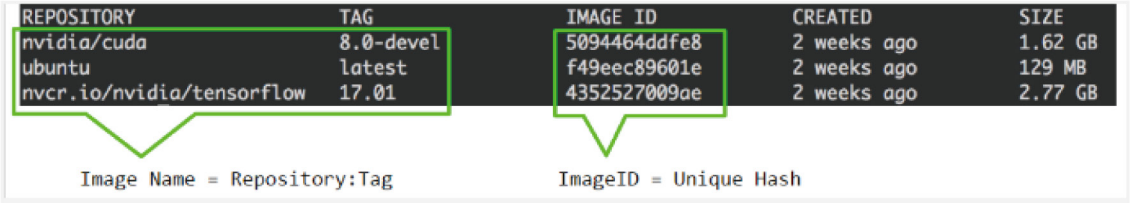

図 2: **docker images** コマンドの出力

図 2 は、次のようなイメージ名の簡単な例を示しています。

- **nvidia-cuda:8.0-devel**
- **ubuntu:latest**
- **nvcr.io/nvidia/tensorflow:17.01**

イメージにタグを追加しない場合、既定で「latest」というタグが追加されますが、すべての NGC コンテナーには明示的なバージョン タグが付けられます。

次のセクションでは、これらのイメージ名を使用してコンテナーを実行します。後のセクションでは、独自のコンテナー作成のほか、既存コンテナーのカスタマイズおよび拡張方法を紹介します。

2.2. CUDA Toolkit コンテナー

CUDA Toolkit は、高性能 GPU アクセラレーション アプリケーションを作成するための開発環境を提供します。このツールキットには、GPU アクセラレーション対応ライブラリ、デバッグおよび最適化ツール、C/C++ コンパイラ、アプリケーションを展開するためのランタイム ライブラリが含まれます。

すべての NGC コンテナー イメージは、CUDA プラットフォーム層 (**nvcr.io/nvidia/cuda**) を基礎としています。これは、他のすべての NGC コンテナーを支えるコンテナー化されたソフトウェア開発スタックのバージョンを表しており、カスタム CUDA アプリケーションでコンテナーを柔軟に構築したいユーザーに最適です。

2.2.1. OS 層

ソフトウェア スタック内で、最下部の層 (ベース層) は OS のユーザー スペースです。この層のソフトウェアには、リリース月に提供されるすべてのセキュリティ パッチが含まれます。

2.2.2. CUDA 層

CUDA® は、NVIDIA が開発したパラレル コンピューティング プラットフォームとプログラミング モデルで、アプリケーション開発者は GPU の大規模な並列処理機能を利用できます。CUDA は、ディープラーニングの GPU アクセラレーションをはじめ、天文学、分子動力学シミュレーション、金融工学など、さまざまな演算処理やメモリ負荷の高いアプリケーションの基盤となります。

2.2.2.1. CUDA ランタイム

CUDA ランタイム層は、展開環境での CUDA アプリケーション実行に必要なコンポーネントを提供します。CUDA ランタイムは、すべての共有ライブラリが CUDA Toolkit と共にパッケージ化されていますが、CUDA コンパイラ コンポーネントは含まれません。

2.2.2.2. CUDA Toolkit

CUDA Toolkit は、GPU アクセラレーション アプリケーションを最適化するための開発環境を提供します。これには GPU アクセラレーション対応 CUDA ライブラリが含まれており、線形代数、画像および動画処理、ディープラーニング、グラフ分析などのさまざまな分野でドロップイン アクセラレーションを行うことができます。カスタム アルゴリズムを開発する場合は、一般的な言語や数値パッケージを利用したり、広く公開されている開発 API と統合したりできます。

第 3 章
NGC コンテナー レジストリ空間

NGC コンテナー レジストリは、空間を使用して、関連アプリケーションの nvidia-docker イメージ リポジトリをグループ化します。これらの空間は、NGC コンテナー イメージをプルまたは実行したり、NGC コンテナー イメージの上に追加のソフトウェアの層を作成したりする場合に、**nvcr.io/<space>/image-name:tag** の形式でイメージ URL に表示されます。

nvcr.io/nvidia

この空間には、シングル GPU 構成とマルチ GPU 構成の両方で NVIDIA GPU をフルに活用する、完全に統合および最適化されたディープラーニング フレームワーク コンテナーのカタログが含まれおり、CUDA Toolkit や DIGITS ワークフローのほか、NVCaffe、Caffe2、Microsoft Cognitive Toolkit (CNTK)、MXNet、PyTorch、TensorFlow、Theano、Torch といった各種ディープラーニング フレームワークがあります。CUDA ランタイム、NVIDIA ライブラリ、オペレーティング システムなど、これらのフレームワーク コンテナーの依存関係は、必要に応じてすぐに実行できる状態で提供されます。

各フレームワークのコンテナー イメージには、完全なソフトウェア開発スタックと共に変更および拡張が可能なソースコードが含まれています。

NVIDIA は、このディープラーニング コンテナーを毎月更新して、常に最高レベルのパフォーマンスを提供しています。

nvcr.io/nvidia-hpcvis

この空間には、HPC 視覚化コンテナーのカタログが含まれます (現在はベータ版)。ParaView と NVIDIA IndeX ボリューム レンダラー、NVIDIA OptiX レイ トレーシング ライブラリ、NVIDIA Holodeck など、業界最先端の視覚化ツールにより、インタラクティブなリアルタイムの視覚化と高品質のビジュアルが実現されます。

nvcr.io/hpc

この空間には、GAMESS、GROMACS、LAMMPS、NAMD、RELION など、パートナー各社から提供されている人気の高いサードパーティ製 GPU 対応 HPC アプリケーション コンテナーのカタログが含まれます。すべてのサードパーティ製コンテナーは NGC コンテナーの標準およびベスト プラクティスに準拠しているため、最新の GPU 最適化 HPC ソフトウェアを簡単にセットアップして実行することができます。

第 4 章
前提条件

HPC コンテナーは、Pascal 以降のアーキテクチャの NVIDIA GPU を搭載した Linux システムで実行できます。Ubuntu 16.04 を含む Linux ディストリビューションがサポートされています。

nvidia-docker は、GPU を活用した Docker イメージを移植するため、起動時に NVIDIA ドライバーのユーザー モード コンポーネントと GPU を Docker コンテナーにマウントするオープンソースのコマンド ライン ツールとして開発されました。

NVIDIA GPU をフルに活用する NGC コンテナーには、**nvidia-docker** が必要です。

HPC 視覚化コンテナーの前提条件は異なります。詳細は unique_14 を参照してください。

- DGX™ ユーザーは、Docker と **nvidia-docker** を「NVIDIA コンテナーの使用準備 (英語)」の手順に従ってインストールします。
- Amazon Web Services (AWS) P3 ユーザーは、「AWS で NGC を使用するためのガイド (英語)」に従ってください。
- AWS 以外のユーザーは、nvidia-docker インストール手順 (英語) に従って、お使いの GPU 製品タイプとオペレーティング システム シリーズ用の最新の NVIDIA ディスプレイ ドライバーをインストールします。システムに NVIDIA ドライバーが構成されていない場合は、ドライバーをダウンロード (英語) してインストールします。
- お使いの NVIDIA GPU がコンピューティング機能 6.0.0 以上のバージョンの Compute Unified Device Architecture® (CUDA) をサポートしていること (Pascal GPU アーキテクチャ世代以降であることなど) を確認します。
- NGC API キーを使用して、NVIDIA® GPU Cloud (NGC) コンテナー レジストリ (**nvcr.io**) にログインします。アクセスおよび API キー取得の手順については、「NGC 入門 (英語)」を参照してください。

第 5 章
コンテナーをプルする

NGC コンテナー レジストリからコンテナーをプルする前に、Docker と nvidia-docker をインストールする必要があります。DGX ユーザーは、「NVIDIA コンテナーの使用準備 (英語)」の手順に従ってください。

また、「NGC 入門 (英語)」に従い、NGC コンテナー レジストリにアクセスしてログインする必要があります。

5.1. 主な概念

pull コマンドと run コマンドを実行するには、次の概念を理解しておく必要があります。

pull コマンドは次のように使用します。

```
docker pull nvcr.io/nvidia/caffe2:17.10
```

run コマンドは次のように使用します。

```
nvidia-docker run -it --rm -v local_dir:container_dir nvcr.io/nvidia/
caffe2:<xx.xx>
```

両方のコマンドを構成する各属性の概念は、次のとおりです。

nvcr.io
コンテナー レジストリの名前。NGC コンテナー レジストリと NVIDIA DGX コンテナー レジストリでは **nvcr.io** です。

nvidia
レジストリ内でコンテナーが含まれる空間の名前。NVIDIA が提供するコンテナーでは、レジストリ空間は **nvidia** です。詳細は「NGC コンテナー レジストリ空間」を参照してください。

-it
コンテナーをインタラクティブ モードで実行します。

--rm
完了時にコンテナーを削除します。

-v
ディレクトリをマウントします。

local_dir
コンテナー内からアクセスするホスト システムのディレクトリまたはファイル (絶対パス)。たとえば、次のパスの **local_dir** は、**/home/jsmith/data/mnist** です。

```
-v /home/jsmith/data/mnist:/data/mnist
```

たとえば、コンテナー内でコマンド **ls /data/mnist** を使用すると、コンテナー外部から **ls /home/jsmith/data/mnist** コマンドを実行した場合と同じファイルが表示されます。

container_dir
コンテナー内の場合のターゲット ディレクトリ。たとえば、次の例では **/data/mnist** がターゲット ディレクトリです。

```
-v /home/jsmith/data/mnist:/data/mnist
```

<xx.xx>
タグ。17.10 など。

5.2. NGC コンテナー レジストリからアクセスしてプルする

このセクションは、クラウド プロバイダー経由の場合に該当します。

AWS などのクラウド サービス プロバイダーから NVIDIA コンテナーにアクセスしている場合は、最初に https://ngc.nvidia.com (英語) の NGC コンテナー レジストリでアカウントを作成する必要があります。アカウントの作成後にコンテナーをプルする際には、データセンターに DGX-1 がある場合と同じコマンドを使用します。ただし、現時点では、NGC コンテナー レジストリにコンテナーを保存することはできません。その代わりに、オンプレミスまたはクラウドにある自分の Docker レジストリにコンテナーを保存します。

インターネット経由で Docker がインストールされている Linux コンピューターから Docker コマンドを実行すると、NGC コンテナー レジストリにアクセスできます。NGC アカウントを有効にした後に、Docker CLI を使用して NGC コンテナー レジストリ (**nvcr.io**) にアクセスできます。

NGC コンテナー レジストリにアクセスする前に、次の前提条件を満たしていることを確認します。要件の詳細は「NGC 入門 (英語)」を参照してください。

- アカウントが有効である。
- NGC コンテナー レジストリへのアクセスを認証するための API キーを持っている。
- nvidia-docker コンテナーを実行可能な権限でクライアント コンピューターにログインしている。

アカウントを有効にした後に、次の 2 つの方法のいずれかで NGC コンテナー レジストリにアクセスできます。

- Docker CLI を使用して NGC コンテナー レジストリからコンテナーをプルする
- NGC コンテナー レジストリ Web インターフェイスを使用してコンテナーをプルする

Docker レジストリは、Docker イメージを保存するサービスです。サービスは、インターネット、企業イントラネット、ローカル マシンに配置できます。たとえば、**nvcr.io** は nvidia-docker イメージの NGC コンテナー レジストリの場所です。

すべての **nvcr.io** Docker イメージでは、「latest (最新)」タグを使用した場合に発生するバージョンのあいまいさを回避するために、明示的なバージョン タグを使用します。たとえば、ローカルで「latest」とタグ付けされたバージョンのイメージによって、レジストリにある別の「latest」バージョンが上書きされる可能性があります。

1. NGC コンテナー レジストリにログインします。

```
$ docker login nvcr.io
```

2. ユーザー名のプロンプトが表示されたら、次のテキストを入力します。

```
$oauthtoken
```

3. **$oauthtoken** ユーザー名は、通常のユーザー名とパスワードではなく API キーで認証するための特殊なユーザー名です。

4. パスワードの入力を求められたら、次の例のように API キーを入力します。

```
Username: $oauthtoken
Password: k7cqFTUvKKdiwGsPnWnyQFYGnlAlsCIRmlP67Qxa
```

ヒント API キーを取得したら、クリップボードにコピーします。これにより、パスワードの入力を求められたときにコマンド シェルに API キーを貼り付けることができます。

5.2.1. Docker CLI を使用して NGC コンテナー レジストリからコンテナーをプルする

このセクションは、クラウド プロバイダー経由で使用している場合に該当します。

nvidia-docker コンテナーをプルする前に、次の前提条件が満たされていることを確認してください。

- クラウド インスタンス システムが「NVIDIA コンテナーの使用準備 (英語)」に従ってコンテナーを実行するようにセットアップされているか、「AWS で NGC を使用するためのガイド (英語)」に従って NGC AWS AMI を使用している。
- コンテナーを含むレジストリ空間に対する読み取りアクセス権を持っている。
- 「NGC コンテナー レジストリからアクセスしてプルする」の手順で NGC コンテナー レジストリにログインしている。
- Docker コマンドを使用できる **docker** グループのメンバーである。

NGC コンテナー レジストリで使用できるコンテナーを参照するには、Web ブラウザーを使用して Web サイト https://ngc.nvidia.com/ (英語) の NGC コンテナー レジストリ アカウントにログインします。

1. レジストリからコンテナーをプルします。たとえば、NAMD コンテナーをプルするには、次のようにします。

```
$ docker pull nvcr.io/hpc/namd:2.13
```

2. システム上の Docker イメージを一覧表示して、コンテナーがプルされていることを確認します。

```
$ docker images
```

特定のコンテナーに関する情報については、コンテナー内の **/workspace/README.md** ファイルを参照してください。

コンテナーのプルが完了すると、科学技術ワークロードの実行、ニューラル ネットワークのトレーニング、ディープラーニング モデルの展開、AI 分析などのジョブをコンテナー内で実行することができます。

5.2.2. NGC コンテナー レジストリ Web インターフェイスを使用してコンテナーをプルする

このセクションは、クラウド プロバイダー経由で使用している場合に該当します。

NGC コンテナー レジストリからコンテナーをプルする前に、Docker と **nvidia-docker** を「NVIDIA コンテナーの使用準備 (英語)」に記載されている場所にインストールする必要があります。また、「NGC 入門 (英語)」に従い、NGC コンテナー レジストリにアクセスしてログインする必要があります。

このタスクの前提条件:

1. クラウド インスタンス システムがインターネットに接続されている。
2. インスタンスに Docker と nvidia-docker がインストールされている。
3. ブラウザーを使用して https://ngc.nvidia.com (英語) の NGC コンテナー レジストリにアクセスでき、アカウントが有効になっている。
4. コンテナーをクラウド インスタンスにプルする必要がある。

1. https://ngc.nvidia.com/ (英語) の NGC コンテナー レジストリにログインします。
2. 左ナビゲーションで、**[登録]** をクリックします。NGC コンテナー レジストリ ページを参照して、使用できる Docker リポジトリとタグを確認します。
3. リポジトリのいずれかをクリックして、そのコンテナー イメージの情報と、コンテナーを実行するときに使用できるタグを表示します。
4. **[プル]** 列でアイコンをクリックして、Docker pull コマンドをコピーします。
5. コマンド プロンプトを開いて、Docker pull コマンドを貼り付けます。コンテナー イメージのプルが開始されます。プルが正常に完了したことを確認します。
6. ローカル システムに Docker コンテナー ファイルを置いてから、コンテナーをローカルの Docker レジストリにロードします。
7. イメージがローカルの Docker レジストリにロードされていることを確認します。

   ```
   $ docker images
   ```

   特定のコンテナーに関する情報については、コンテナー内の **/ workspace/README.md** ファイルを参照してください。

第 6 章
コンテナーの実行

コンテナーを実行するには、レジストリ、リポジトリ、タグを指定して **nvidia-docker run** コマンドを実行します。

nvidia-docker ディープラーニング フレームワーク コンテナーを実行する前に、**nvidia-docker** をインストールする必要があります。詳細は、「NVIDIA コンテナーの使用準備 (英語)」を参照してください。

1. ユーザーとして、コンテナーをインタラクティブに実行します。

```
$ nvidia-docker run -it --rm -v local_dir:container_dir
           nvcr.io/nvidia/<repository>:<xx.xx>
```

次の例では、インタラクティブ モードの NVCaffe コンテナーの 2016 年 12 月のリリース (16.12) を実行します。ユーザーがコンテナーを終了すると、コンテナーは自動的に削除されます。

```
$ nvidia-docker run --rm -ti nvcr.io/nvidia/caffe:16.12

===========
== Caffe ==
===========

NVIDIA Release 16.12 (build 6217)

Container image Copyright (c) 2016, NVIDIA CORPORATION. All rights reserved.
Copyright (c) 2014, 2015, The Regents of the University of California
 (Regents)
All rights reserved.

Various files include modifications (c) NVIDIA CORPORATION. All rights
 reserved.
NVIDIA modifications are covered by the license terms that apply to the
 underlying project or file.
root@df57eb8e0100:/workspace#
```

2. 実行するジョブをコンテナー内から起動します。

実行する正確なコマンドは、実行しているコンテナーのディープラーニング フレームワークと、実行するジョブによって異なります。詳細はコンテナーの **/workspace/README.md** ファイルを参照してください。

次の例は、1 つの GPU で **caffe time** コマンドを実行して、**deploy.prototxt** モデルの実行時間を測定します。

```
# caffe time -model models/bvlc_alexnet/ -solver deploy.prototxt -gpu=0
```

3. オプション: 同じ NVCaffe コンテナーで、非インタラクティブ モードで 2016 年 12 月リリース (16.12) を実行します。

```
% nvidia-docker run --rm nvcr.io/nvidia/caffe:16.12 caffe time -model
    /workspace/models/bvlc_alexnet -solver /workspace/deploy.prototxt - gpu=0
```

6.1. nvidia-docker run

nvidia-docker run コマンドを実行する場合:

- Docker Engine は、ソフトウェアを実行するコンテナーにイメージをロードします。
- コマンドで使用する追加のフラグと設定を含めることによって、ランタイムのコンテナー リソースを定義します。これらのフラグと設定については、次のセクションで説明します。
- GPU は、Docker コンテナーで明示的に定義されます (既定ですべての GPU を対象に、NV_GPU 環境変数で指定できます)。

6.2. ユーザーの指定

指定されない限り、コンテナー内のユーザーはルート ユーザーとなります。

コンテナー内で実行する場合、ルート ユーザーはホスト オペレーティング システムまたはネットワーク ボリューム上に作成されたファイルにアクセスできます。許可されていないユーザーは、コンテナー内のユーザーの ID を設定する必要があります。たとえば、コンテナー内のユーザーを現在実行しているユーザーとして設定するには、次のコマンドを実行します。

```
% nvidia-docker run -ti --rm -u $(id -u):$(id -g) nvcr.io/nvidia/
<repository>:<tag>
```

通常は、指定されたユーザーとグループがコンテナー内に存在しないため警告が発生します。次のようなメッセージが表示されます。

```
groups: cannot find name for group ID 1000I have no name! @c177b61e5a93:/
workspace$
```

この警告は原則として無視できます。

6.3. 削除フラグの設定

既定では、Docker コンテナーは実行後もシステム上に残ります。繰り返されるプル操作または実行操作は、コンテナーを終了した後でもローカル ディスク上の多くの領域を使用します。そのため、終了時に nvidia-docker コンテナーをクリーン アップすることが必要です。

コンテナーへの変更を保存する場合や実行後にジョブ ログにアクセスする場合は、**--rm** フラグを使用しないでください。

終了時にコンテナーを自動的に削除するには、**--rm** フラグを追加してコマンドを実行します。

```
% nvidia-docker run --rm nvcr.io/nvidia/<repository>:<tag>
```

6.4. インタラクティブ フラグの設定

既定では、コンテナーはバッチ モードで実行されます。このため、実行されたコンテナーはユーザーの操作なしで終了します。コンテナーは、サービスとしてインタラクティブ モードで実行することもできます。

インタラクティブ モードで実行するには、**-ti** フラグを実行コマンドに追加します。

```
% nvidia-docker run -ti --rm nvcr.io/nvidia/<repository>:<tag>
```

6.5. ボリューム フラグの設定

コンテナーにはデータセットは含まれないため、データセットを使用する場合は、ホスト オペレーティング システムからコンテナーにボリュームをマウントする必要があります。詳細は、「コンテナーでデータを管理する (英語)」を参照してください。

通常は、Docker ボリュームまたはホスト データ ボリュームを使用します。Docker ボリュームとの主な違いは、Docker ボリュームは Docker にプライベートで、Docker コンテナー間のみで共有される点です。Docker ボリュームはホスト オペレーティング システムからは見えず、データ ストレージは Docker が管理します。ホスト データ ボリュームは、ホスト オペレーティング システムから使用できる任意のディレクトリです。ローカル ディスクまたはネットワーク ボリュームを使用できます。

例 1

ホスト オペレーティング システムのディレクトリ **/raid/imagedata** を **/images** としてコンテナーにマウントします。

```
% nvidia-docker run -ti --rm -v /raid/imagedata:/images
          nvcr.io/nvidia/<repository>:<tag>
```

例 2

コンテナーのローカルの Docker ボリューム **data** (存在しない場合は作成する必要があります) を **/imagedata** としてマウントします。

```
% nvidia-docker run -ti --rm -v data:/imagedata nvcr.io/nvidia/
          <repository>:<tag>
```

6.6. マッピング ポート フラグの設定

ディープラーニング GPU トレーニング システム™ (DIGITS) などのアプリケーションは、通信用のポートを使用します。ローカル システム専用のポートを開く、またはローカル システム以外のネットワークに属する他のコンピューターが使用できるようにするよう制御できます。

たとえば、DIGITS では、コンテナー イメージ 16.12 の DIGITS 5.0 を起動すると、既定では DIGITS サーバーはポート 5000 を使用します。ただし、コンテナーを起動した後、コンテナーの IP アドレスがすぐにわからない場合があります。コンテナーの IP アドレスを確認するには、次の方法のいずれかを選択できます。

- ローカル システム ネットワーク スタックを使用してポートを公開する (**--net=host**)。ここでコンテナーのポート 5000 は、ローカル システムのポート 5000 として使用できます。

または、

- ポートをマッピングする (**-p 8080:5000**)。コンテナーのポート 5000 は、ローカル システムのポート 8080 として使用できます。

どちらの場合も、ローカル システム以外のユーザーには、DIGITS がコンテナー内で実行されていることが見えません。ポートを公開しないと、ホストからポートを使用することはできますが、外部からは使用できません。

6.7. 共有メモリ フラグの設定

PyTorch や Microsoft® Cognitive Toolkit™ などの特定のアプリケーションでは、共有メモリ バッファーを使用してプロセス間で通信します。共有メモリは、NVIDIA® Collective Communications Library™ (NCCL) を使用する MXNet™ や TensorFlow™ などのシングル プロセス アプリケーションでも必要です。

既定では Docker コンテナーには 64 MB の共有メモリが割り当てられています。これは、特に 8 個の GPU すべてを使用する場合、不十分です。**1 GB** など、特定のサイズに共有メモリ制限を上げるには、**--shm-size=1g** フラグを **docker run** コマンドに含めます。

または、**--ipc=host** フラグを指定すると、コンテナー内部のホストの共有メモリを再利用できます。この後者の方法は、共有メモリ バッファーのデータが他のコンテナーから見えてしまうため、セキュリティの問題となります。

6.8. GPU フラグの公開制限の設定

コンテナーの中で、使用可能なすべての GPU を利用するためのスクリプトとソフトウェアを設定します。GPU の使用率を高いレベルで調整するには、このフラグを使用してホストからコンテナーへの GPU 公開を制限します。たとえば、GPU 0 と GPU 1 のみがコンテナーから見えるようにするには、次のコマンドを実行します。

```
$ NV_GPU=0,1 nvidia-docker run...
```

このフラグは、使用する GPU を制限するための一時的な環境変数です。

Linux **cgroups** を基礎とした Docker のデバイスマッピング機能を使用すると、コンテナーごとに特定の GPU を定義できます。

6.9. コンテナーの寿命

--rm フラグを **nvidia-docker run** コマンドに渡さなければ、終了したコンテナーの状態は無期限に保存されます。次のコマンドを使用して、ディスクに保存されているすべての終了したコンテナーとサイズを一覧表示できます。

```
$ docker ps --all --size --filter Status=exited
```

ディスク上のコンテナーのサイズはコンテナーの実行中に作成されるファイルによって決まるため、終了したコンテナーのディスク容量は小さくなります。

次のコマンドを実行することで、終了したコンテナーを完全に削除できます。

```
docker rm [CONTAINER ID]
```

終了後のコンテナーの状態を保存しておくと、次のような標準の Docker コマンドを使用して引き続き操作できます。

- **docker logs** コマンドを実行して、過去の実行のログを検証します。

  ```
  $ docker logs 9489d47a054e
  ```

- **docker cp** コマンドを使用してファイルを抽出します。

```
$ docker cp 9489d47a054e:/log.txt .
```

- **docker restart** コマンドを使用して、停止しているコンテナーを再起動します。

```
$ docker restart <container name>
```

NVCaffe™ コンテナーの場合は、次のコマンドを実行します。

```
$ docker restart caffe
```

- **docker commit** コマンドでは、新しいイメージを作成して変更を保存できます。詳細は、「例 3: docker commit を使用したコンテナーのカスタマイズ」を参照してください。

コンテナー使用中に作成されるデータ ファイルが最終イメージに追加されるため、Docker コンテナーを変更する際には注意が必要です。特に、コア ダンプ ファイルとログ ファイルによって最終イメージのサイズが大幅に増える可能性があります。

第 7 章
Singularity を使用した NGC コンテナーの実行

7.1. 概要

この章では、HPC コンテナーを NGC レジストリからプルし、Singularity を使用して実行する手順を説明します。

Singularity v2.6 以上では、Docker レジストリがネイティブにサポートされます。これにより、NGC でホストされている Docker イメージなど、大半の Docker イメージを単一の手順でプルして Singularity 互換のイメージに変換できます。

NVIDIA では、HPC コンテナーと Singularity との互換性をテストするため、厳密な QA プロセスの中で NGC イメージを Singularity 形式に変換して実行しています。以降のセクションでは、Singularity ランタイムを使用して NGC コンテナーをプルして実行する手順を説明します。アプリケーション固有の情報は異なる可能性があるため、Singularity を使用して実行する前にコンテナー固有のドキュメントに従うことをお勧めします。コンテナーのドキュメントに Singularity の情報が含まれていない場合、該当のコンテナーは Singularity を使用してテストされていません。

7.2. 前提条件

このセクションの手順の前提条件は次のとおりです。

- システムに Singularity **v2.6 以上**をインストール (英語) している。
- NGC Web サイトで次の手順を実行している (「NGC 入門 (英語)」を参照)。
  - https://ngc.nvidia.com/signup (英語) で NGC アカウントの登録を済ませている。
  - NGC コンテナー レジストリにアクセスするための NGC API キーを作成している。
  - NGC Web サイトを参照して、利用可能な NGC コンテナーと実行するタグを特定している。
- udev ルールを正しく設定している (詳細はこちら (英語) を参照)。

Singularity で使用するため、`nvidia-container-cli` をインストールすることをお勧めします。詳細はこちら (英語) を参照してください。

7.3. Singularity イメージへの変換

Singularity を使用して実行する前に、NGC コンテナー レジストリの認証資格情報を設定する必要があります。

最も簡単な方法は、次の環境変数を設定することです。

bash

```
$ export SINGULARITY_DOCKER_USERNAME='$oauthtoken'
$ export SINGULARITY_DOCKER_PASSWORD=<NVIDIA NGC API key>
```

tcsh

```
> setenv SINGULARITY_DOCKER_USERNAME '$oauthtoken'
> setenv SINGULARITY_DOCKER_PASSWORD <NVIDIA NGC API key>
```

NVIDIA NGC API キーを取得して使用する方法は、こちら (英語) を参照してください。

環境に資格情報を設定すると、NGC コンテナーをローカルの Singularity イメージにプルできるようになります。

```
$ singularity build <app_tag>.simg docker://nvcr.io/<repository>/<app:tag>
```

コンテナーは次の形式で直近のディレクトリに保存されます。

```
<app_tag>.simg
```

たとえば、NGC でホストされている HPC アプリケーション NAMD を Singularity イメージに変換するには、次のコマンドを実行します。

```
$ singularity build namd_2.12-171025.simg docker://nvcr.io/hpc/namd:2.12-171025
```

ビルドが完了すると、namd_2.12-171025.simg という Singularity イメージ ファイルを作業ディレクトリで使用できるようになります。

7.4. Singularity コンテナーの実行

ローカルの Singularity イメージをプルすると、次の実行モードがサポートされます。

- Singularity を使用したコマンド ライン実行 (英語)
- Singularity を使用したインタラクティブ シェルの実行 (英語)

NVIDIA GPU を活用するには、コンテナーの実行時に Singularity フラグ **--nv** を使用する必要があります。Singularity フラグの詳細はこちら (英語) を参照してください。

重要

Amazon マシン イメージ ユーザーの場合

Amazon Web Service 上の Amazon マシン イメージの既定の root umask は 077 です。Singularity を正常に実行するには、umask 022 を使用してインストールする必要があります。Singularity を正しい権限でインストール (または再インストール) する方法は次のとおりです。

- Singularity をアンインストールします (インストールしている場合)。
- umask を **`$ umask 0022`** に変更します。
- Singularity をインストールします。
- umask **`$ umask 0077`** を復元します。

これにより、インストールされた Singularity ファイルに既定の 0700 ではなく 0755 の権限が付与されます。注: umask コマンドは、直近のシェルのみに変更を適用します。同じシェル セッションから umask を使用して Singularity をインストールしてください。

7.4.1. ディレクトリへのアクセス

Singularity コンテナーは基本的に読み取り専用です。アプリケーションの入力を行ったり、アプリケーションの出力を保持したりする場合には、ホスト ディレクトリをコンテナーにバインドします。これには Singularity の **`-B`** フラグを使用します。このフラグの形式は **`-B <host_src_dir>:<container_dst_dir>`** です。ホスト ディレクトリをコンテナーにバインドしたら、コンテナーの外部と同様の方法でコンテナーの内部からこのディレクトリを操作できます。

`--pwd <container_dir>` フラグを使用するのも便利です。このフラグは、コマンドの現在の作業ディレクトリをコンテナー内で実行するように設定できます。

次の Singularity コマンドでは、ホスト上の現在の作業ディレクトリをコンテナー プロセス内の **`/host_pwd`** にマウントし、コンテナー プロセスの現在の作業ディレクトリを **`/host_pwd`** に設定します。これにより、実行される **`<cmd>`** は、Singularity の呼び出し元のホスト ディレクトリから起動されます。

```
$ singularity exec --nv -B $(pwd):/host_pwd --pwd /host_pwd <image.simg> <cmd>
```

注: コンテナー イメージ内に存在しないディレクトリにバインドするには、カーネルと構成のサポートが必要です。このサポートは、CentOS や RHEL 6 といった古いカーネルを実行している一部のシステムでは提供されていない可能性があります。不明な場合は、システム管理者に問い合わせてください。

7.4.2. Singularity を使用したコマンド ライン実行

次のようにコマンド ラインから Singularity を使用してコンテナーを実行します。

```
$ singularity exec --nv <app_tag>.simg <command_to_run>
```

これはコンテナー内で NAMD 実行ファイルを実行する例です。

```
$ singularity exec --nv namd_2.12-171025.simg /opt/namd/namd-multicore
```

7.4.3. Singularity を使用したインタラクティブ シェルの実行

コンテナー内でシェルを起動するには、次のコマンドを実行します。

```
$ singularity exec --nv <app_tag>.simg /bin/bash
```

これは NAMD コンテナー内でインタラクティブ シェルを起動する例です。

```
$ singularity exec --nv namd_2.12-171025.simg
```

第 8 章
コンテナーのカスタマイズ

nvidia-docker イメージは、調整済みでパッケージ化されているため、すぐに実行することができます。さらに、企業のインフラに合わせて新しいイメージを構築したり、カスタム コード、ライブラリ、データ、設定を使用して既存のイメージを補強したりすることもできます。このセクションでは、新規コンテナーの作成、コンテナーのカスタマイズ、ディープラーニング フレームワークの拡張による機能追加、開発環境の拡張フレームワークを使用したコード開発、バージョン リリース用のパッケージ化などについて、演習を交えながら順に説明します。

既定では、コンテナー構築の必要はありません。NGC のコンテナー レジストリ (nvcr.io) には、すぐに使用できる一連のコンテナーがあります。これらは、ディープラーニング、科学計算、視覚化などの専用コンテナーと、CUDA Toolkit のみを含むコンテナーです。

コンテナーの優れている点は、既存コンテナーをベースにして新規コンテナーを作成できることです。これを「カスタマイズ」または「拡張」と呼びます。完全にゼロから作成することもできますが、これらのコンテナーは通常、GPU システムで動作するため、少なくとも OS と CUDA を含む `nvcr.io` コンテナーから開始することをお勧めします。ただしこの方法に限らず、GPU の代わりに CPU で動作するコンテナーを作成することもできます。その場合は、Docker の OS のみを含むコンテナーから開始できます。または、開発を簡素化するために、CUDA を含むコンテナーで CUDA を使用しないという方法もあります。

DGX-1 と DGX Station の場合は、変更または拡張されたコンテナーを NVIDIA DGX コンテナー レジストリ (`nvcr.io`) にプッシュまたは保存できます。これらを DGX システムの他のユーザーと共有することもできますが、管理者の協力が必要です。

現時点では、カスタマイズされたコンテナーを NGC コンテナー レジストリ (クラウドベース) ソリューションから `nvcr.io` に保存することはできません。カスタマイズまたは拡張されたコンテナーは、ユーザーのプライベート コンテナー リポジトリに保存できます。カスタマイズまたは拡張されたコンテナーは、ユーザーのプライベート コンテナー リポジトリに保存できます。

すべての nvidia-docker ディープラーニング フレームワーク イメージには、フレームワーク自体を構築するためのソースおよびすべての前提条件が含まれていることに注意してください。

注意: Docker の構築時に NVIDIA ドライバーを Docker® イメージにインストールしないでください。nvidia-docker は本質的に、コードを GPU で実行するために必要なコンポーネントを使用してコンテナーを透過的にプロビジョニングする docker のラッパーです。

NVIDIA は、テストおよび調整済みですぐに実行できる多数のイメージを NGC コンテナー レジストリを通じて提供しています。任意のイメージをプルしてコンテナーを作成し、選択したソフトウェアやデータを追加できます。

ベスト プラクティスは、新規 docker イメージの開発に **`docker commit`** の代わりに Dockerfile を使用することです。この方法では、docker イメージの開発中に行われる変更を効率的にバージョン管理するための可視性と機能が得られます。docker commit による方法は、短期の破棄可能なイメージのみに適しています (例として、「例 3: docker commit を使用したコンテナーのカスタマイズ」を参照)。

すべての nvidia-docker ディープラーニング フレームワーク イメージには、フレームワーク自体を構築するためのソースおよびすべての前提条件が含まれていることに注意してください。

注意: Docker の構築時に NVIDIA ドライバーを Docker イメージにインストールしないでください。nvidia-docker は本質的に、コードを GPU で実行するために必要なコンポーネントを使用してコンテナーを透過的にプロビジョニングする **`docker`** のラッパーです。

ベスト プラクティスは、新規 docker イメージの開発に **`docker commit`** を使用せず、代わりに Dockerfile を使用することです。Dockerfile による方法では、Docker イメージの開発中に行われる変更を効率的にバージョン管理するための可視性と機能が得られます。Docker commit による方法は、短期の破棄可能イメージにのみ適しています。

Docker ファイルの記述の詳細は、「Dockerfile の記述のベスト プラクティス (英語)」を参照してください。

8.1. コンテナーをカスタマイズするメリットと制約

コンテナーは、個々のニーズに合わせてカスタマイズできます。たとえば、依存する特定のソフトウェアが NVIDIA の提供しているコンテナーに含まれない場合などです。どのような理由でも、コンテナーをカスタマイズすることは可能です。コンテナーをカスタマイズする理由に制約はありません。

フレームワークのソースに含まれている場合を除いて、コンテナー イメージにはサンプル データセットやサンプル モデル定義は含まれません。コンテナーにサンプル データセットやモデルが含まれているかどうかを必ず確認してください。

8.2. 例 1: 新規コンテナーを構築する

Docker は、Dockerfile を使用して Docker イメージを作成または構築します。Dockerfile は、新規 docker イメージを作成するために Docker が順に実行するコマンドを含むスクリプトです。簡潔に言えば、Dockerfile はコンテナー イメージのソース コードとも言えます。Dockerfile は、ベース イメージを基に作成します。

詳細は、「Dockerfile の記述のベスト プラクティス (英語)」を参照してください。

1. ローカル ハード ドライブに作業ディレクトリを作成します。
2. そのディレクトリ内で、テキスト エディターを開き、**`Dockerfile`** というファイルを作成します。ファイルを作業ディレクトリに保存します。
3. **`Dockerfile`** を開き、次の内容を記述します。

```
FROM ubuntu:14.04
RUN apt-get update && apt-get install -y curl
CMD echo "hello from inside a container"
```

最後の行の **`CMD`** で、コンテナーを作成するときに指定したコマンドが実行されます。これは、コンテナーが正しく構築されたかどうかを確認する 1 つの方法です。

この例では、DGX™ システム リポジトリではなく Docker リポジトリからもコンテナーをプルしています。この後に、NVIDIA® リポジトリを使用するいくつかの例を紹介します。

4. **Dockerfile** を保存して閉じます。

5. イメージを構築します。イメージを構築してタグを作成するために、次のコマンドを実行します。

```
$ docker build -t <new_image_name>:<new_tag> .
```

このコマンドは、Dockerfile と同じディレクトリで実行されました。

各行ごとに docker 構築プロセスの「ステップ」のリストが出力されます。

たとえば、コンテナーに **test1** という名前を付け、**latest** とタグ付けします。説明用にプライベート DGX システム リポジトリの名前を **nvidian_sas** としています。次のコマンドでコンテナーが構築され、出力内容を確認できます。何が出力されるかがわかるように出力の一部を示します。

```
$ docker build -t test1:latest .
Sending build context to Docker daemon 3.072 kB
Step 1/3 : FROM ubuntu:14.04
14.04: Pulling from library/ubuntu
...
Step 2/3 : RUN apt-get update && apt-get install -y curl
...
Step 3/3 : CMD echo "hello from inside a container"
 ---> Running in 1f491b9235d8
 ---> 934785072daf
Removing intermediate container 1f491b9235d8
Successfully built 934785072daf
```

イメージの構築の詳細は、「docker build (英語)」を参照してください。イメージのタグ付けの詳細は、「docker tag (英語)」を参照してください。

6. 正常に構築されたことを確認するために、メッセージが表示されます。

```
Successfully built 934785072daf
```

このメッセージは、正常に構築されたことを示します。これ以外のメッセージの場合は、正常に構築されなかったことを示します。

イメージが構築され、ランダムの場合は番号 **934785072daf** が割り当てられます。

7. イメージを表示できることを確認します。次のコマンドを実行して、コンテナーを表示します。

```
$ docker images
REPOSITORY          TAG                 IMAGE ID            CREATED             SIZE
test1               latest              934785072daf        19 minutes ago      222 MB
```

これで、新しいコンテナーが利用できるようになりました。

コンテナーは、この DGX システムにローカルです。コンテナーをプライベート リポジトリに格納する場合は、次の手順に従います。

8. コンテナーをプッシュしてプライベート Docker リポジトリに格納します。

これは、DGX-1™ と DGX Station のみで動作します。

a) プッシュの最初の手順は、タグ付けです。

```
$ docker tag test1 nvcr.io/nvidian_sas/test1:latest
```

b) イメージにタグが付けられます。ここでは、nvcr.io の **nvidian_sas** というプライベート プロジェクトにプッシュします。

```
$ docker push nvcr.io/nvidian_sas/test1:latest
The push refers to a repository [nvcr.io/nvidian_sas/test1]
…
```

c) コンテナーが **nvidian_sas** リポジトリに表示されることを確認します。

8.3. 例 2: Dockerfile を使用したコンテナーのカスタマイズ

この例では、Dockerfile を使用して **nvcr.io** の NVCaffe コンテナーをカスタマイズします。コンテナーをカスタマイズする前に、**docker pull** コマンドを使用して NVCaffe 17.03 コンテナーをレジストリにロードしておく必要があります。

```
$ docker pull nvcr.io/nvidia/caffe:17.03
```

本書の最初に説明したように、nvcr.io の Docker コンテナーにもサンプル Dockerfile があります。このサンプルでは、フレームワークを変更して Docker イメージを再構築する方法を説明しています。**/workspace/docker-examples** ディレクトリには、2 つのサンプル Dockerfile があります。この例では、コンテナーをカスタマイズするためのテンプレートとして、**Dockerfile.customcaffe** ファイルを使用します。

1. ローカル ハード ドライブに **my_docker_images** という作業ディレクトリを作成します。
2. テキスト エディターを開き、**Dockerfile** というファイルを作成します。ファイルを作業ディレクトリに保存します。
3. 再度 **Dockerfile** を開き、ファイルに次の行を含めます。

```
FROM nvcr.io/nvidia/caffe:17.03
# APPLY CUSTOMER PATCHES TO CAFFE
# Bring in changes from outside container to /tmp
# (assumes my-caffe-modifications.patch is in same directory as
Dockerfile)
#COPY my-caffe-modifications.patch /tmp

# Change working directory to NVCaffe source path
WORKDIR /opt/caffe

# Apply modifications
#RUN patch -p1 < /tmp/my-caffe-modifications.patch

# Note that the default workspace for caffe is /workspace
RUN mkdir build && cd build && \
  cmake -DCMAKE_INSTALL_PREFIX:PATH=/usr/local -DUSE_NCCL=ON
-DUSE_CUDNN=ON -DCUDA_ARCH_NAME=Manual -DCUDA_ARCH_BIN="35 52 60 61"
-DCUDA_ARCH_PTX="61" .. && \
  make -j"$(nproc)" install && \
  make clean && \
  cd .. && rm -rf build

# Reset default working directory
WORKDIR /workspace
```

ファイルを保存します。

4. **docker build** コマンドを使用してイメージを構築し、リポジトリ名とタグを指定します。次の例では、リポジトリ名は *corp/caffe* で、タグは *17.03.1PlusChanges* です。この場合のコマンドは次のとおりです。

```
$ docker build -t corp/caffe:17.03.1PlusChanges .
```

5. **nvidia-docker run** コマンドを使用して、Docker イメージを実行します。たとえば、次のようにします。

```
$ nvidia-docker run -ti --rm corp/caffe:17.03.1PlusChanges .
```

8.4. 例 3: docker commit を使用したコンテナーのカスタマイズ

この例では、docker commit コマンドを使用して、コンテナーの現在の状態を Docker イメージにフラッシュします。これは推奨されるベスト プラクティスではありませんが、実行中のコンテナーを変更して保存する必要がある場合に役立ちます。この例では、apt-get タグを使用して、ユーザーがルートで実行する必要があるパッケージをインストールします。

- 説明のために、サンプルの手順では NVCaffe イメージのリリース 17.04 を使用しています。
- コンテナーを実行する際に、**--rm** フラグは使用しないでください。コンテナーを実行する際に **--rm** フラグを使用すると、コンテナーの終了と共に変更内容が失われます。

1. **nvcr.io** リポジトリから DGX システムに Docker コンテナーをプルします。たとえば、次のコマンドは NVCaffe コンテナーをプルします。

```
$ docker pull nvcr.io/nvidia/caffe:17.04
```

2. nvidia-docker を使用して、DGX システムでコンテナーを実行します。

```
$ nvidia-docker run -ti nvcr.io/nvidia/caffe:17.04
```

```
==================
== NVIDIA Caffe ==
==================

NVIDIA Release 17.04 (build 26740)

Container image Copyright (c) 2017, NVIDIA CORPORATION. All rights
 reserved.
Copyright (c) 2014, 2015, The Regents of the University of California
 (Regents)
All rights reserved.

Various files include modifications (c) NVIDIA CORPORATION. All rights
 reserved.
NVIDIA modifications are covered by the license terms that apply to the
 underlying project or file.

NOTE: The SHMEM allocation limit is set to the default of 64MB. This may be
 insufficient for NVIDIA Caffe. NVIDIA recommends the use of the following
 flags:
  nvidia-docker run --shm-size=1g --ulimit memlock=-1 --ulimit
 stack=67108864...

root@1fe228556a97:/workspace#
```

3. これで、コンテナーのルート ユーザーになります (プロンプトを確認してください)。**apt** コマンドを使用すると、パッケージをプルしてコンテナーに格納できます。

NVIDIA コンテナーは、Ubuntu で apt-get パッケージ マネージャーを使用することによって構築されます。使用している個々のコンテナーの詳細は、コンテナーのリリース ノート「ディープラーニングのドキュメント (英語)」を確認してください。

この例では、MATLAB の GNU クローンである Octave をコンテナーにインストールします。

```
# apt-get update
# apt install octave
```

apt を使用して Octave をインストールする前に、まず **apt-get update** を実行する必要があります。

4. ワークスペースを終了します。

```
# exit
```

5. **docker ps -a** を使用してコンテナーのリストを表示します。例として、次に **docker ps -a** コマンドの出力を示します。

```
$ docker ps -a
CONTAINER ID      IMAGE                          CREATED       ...
1fe228556a97      nvcr.io/nvidia/caffe:17.04  3 minutes ago ...
```

6. これで、Octave をインストールした場所で実行されるコンテナーから、新しいイメージを作成できます。次のコマンドを使用してコンテナーをコミットします。

```
$ docker commit 1fe228556a97 nvcr.io/nvidian_sas/caffe_octave:17.04
sha256:0248470f46e22af7e6cd90b65fdee6b4c6362d08779a0bc84f45de53a6ce9294
```

7. イメージのリストを表示します。

```
$ docker images
REPOSITORY                       TAG           IMAGE ID      ...
nvidian_sas/caffe_octave 17.04         75211f8ec225  ...
```

8. 検証のために、コンテナーを再度実行して、Octave が意図した場所に実際にあることを確認します。

これは、DGX-1 と DGX Station のみで動作します。

```
$ nvidia-docker run -ti nvidian_sas/caffe_octave:17.04
```

```
==================
== NVIDIA Caffe ==
==================

NVIDIA Release 17.04 (build 26740)

Container image Copyright (c) 2017, NVIDIA CORPORATION. All rights
 reserved. Copyright (c) 2014, 2015, The Regents of the University of
 California (Regents) All rights reserved.

Various files include modifications (c) NVIDIA CORPORATION. All rights
 reserved. NVIDIA modifications are covered by the license terms that apply
 to the underlying project or file.
```

```
NOTE: The SHMEM allocation limit is set to the default of 64MB. This may be
 insufficient for NVIDIA Caffe. NVIDIA recommends the use of the following
 flags:
  nvidia-docker run --shm-size=1g --ulimit memlock=-1 --ulimit
 stack=67108864...

root@2fc3608ad9d8:/workspace# octave
octave: X11 DISPLAY environment variable not set
octave: disabling GUI features
GNU Octave, version 4.0.0
Copyright (C) 2015 John W. Eaton and others.
This is free software; see the source code for copying conditions.
There is ABSOLUTELY NO WARRANTY; not even for MERCHANTABILITY or
FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE. For details, type 'warranty'.

Octave was configured for "x86_64-pc-linux-gnu".

Additional information about Octave is available at http://www.octave.org.

Please contribute if you find this software useful.
For more information, visit http://www.octave.org/get-involved.html

Read http://www.octave.org/bugs.html to learn how to submit bug reports.
For information about changes from previous versions, type 'news'.

octave:1>
```

Octave プロンプトが表示されているため、Octave はインストールされています。

9. コンテナーを各自のプライベート リポジトリに保存する場合は (Docker では「プッシュ」と呼ばれます)、**docker push...** コマンドを使用できます。

```
$ docker push nvcr.io/nvidian_sas/caffe_octave:17.04
```

新しい docker イメージが利用可能になりました。このことはローカルの Docker リポジトリで確認できます。

8.5. 例 4: Docker を使用したコンテナーの開発

開発者がコンテナーを拡張するユース ケースには、主に次の 2 つがあります。

1. プロジェクトのすべての不変の依存関係を含むが、ソース コード自体は含まない開発イメージを作成する。
2. ソースの最終版とソフトウェアのすべての依存関係を含む運用イメージまたはテスト イメージを作成する。

データセットは、コンテナー イメージに含まれていません。コンテナー イメージは、データセットと結果のボリューム マウントを想定して設計するのが理想的です。

これらの例では、ローカル データセットをホストの **/raid/datasets** から **/dataset** に、コンテナー内の読み取り専用ボリュームとしてマウントします。現在の実行中の出力を取得するために、ジョブ固有のディレクトリもマウントします。

これらの例では、コンテナーを起動するたびにタイムスタンプ付きの出力ディレクトリを作成し、それを **/output** にマッピングします。この方法では、順に起動したコンテナーの出力を個別に取得できます。

開発やモデルの反復処理のためにコンテナーにソースを格納すると、ワークフロー全体が複雑化します。たとえば、ソース コードをコンテナー内に置く場合、エディター、バージョン管理ソフトウェア、dotfile などもコンテナーに格納する必要があります。

しかし、ソース コードの実行に必要なすべてを含む開発イメージを作成しておけば、ソース コードをコンテナーにマッピングして、ホスト ワークステーションの開発環境を使用できます。モデルの最終版を共有するには、バージョン管理されたソース コードのコピーと、開発環境でトレーニングされた重みとをパッケージ化するのが便利です。

例として、Isola などによる「Conditional Adversarial Networks によるイメージ間の変換 (英語)」の作業をオープンソースに実装するための開発と提供の例を挙げます。これは pix2pix (英語) で利用できます。Pix2Pix は、Conditional Adversarial Network を使用する入力イメージから出力イメージへのマッピングを学習する Torch 実装です。オンライン プロジェクトは時間経過と共に変化しますが、ここでは、スナップショット バージョンの **d7e7b8b557229e75140cbe42b7f5dbf85a67d097** change-set に合わせます。

このセクションでは、コンテナーを仮想環境として使用し、プロジェクトに必要なすべてのプログラムとライブラリをコンテナーに含めます。

ネットワーク定義とトレーニング スクリプトは、コンテナー イメージとは別に保管されています。実際に実行されるファイルはホストに永続的に保存され、実行時のみにコンテナーにマッピングされるため、このモデルは反復型の開発に効果的です。

元のプロジェクトとの違いは、「変更の比較 (英語)」で見ることができます。

開発に使用するマシンが長期間のトレーニング セッションを実行するマシンと異なる場合は、開発中の状態をコンテナーにパッケージ化することもできます。

1. ローカル ハード ドライブに作業ディレクトリを作成します。

```
mkdir Projects
$ cd ~/Projects
```

2. git によって Pix2Pix git リポジトリのクローンを作成します。

```
$ git clone https://github.com/phillipi/pix2pix.git
$ cd pix2pix
```

3. `git checkout` コマンドを実行します。

```
$ git checkout -b devel d7e7b8b557229e75140cbe42b7f5dbf85a67d097
```

4. データセットをダウンロードします。

```
bash ./datasets/download_dataset.sh facades

I want to put the dataset on my fast /raid storage.
$ mkdir -p /raid/datasets
$ mv ./datasets/facades /raid/datasets
```

5. **Dockerfile** という名前でファイルを作成し、次の行を追加します。

```
FROM nvcr.io/nvidia/torch:17.03
RUN luarocks install nngraph
RUN luarocks install
https://raw.githubusercontent.com/szym/display/master/display-scm-0.rockspec
WORKDIR /source
```

6. 開発用 Docker コンテナー イメージ (**build-devel.sh**) を構築します。

```
docker build -t nv/pix2pix-torch:devel .
```

7. 次の **train.sh** スクリプトを作成します。

```
#!/bin/bash -x
ROOT="${ROOT:-/source}"
DATASET="${DATASET:-facades}"
DATA_ROOT="${DATA_ROOT:-/datasets/$DATASET}"
DATA_ROOT=$DATA_ROOT name="${DATASET}_generation"
which_direction=BtoA th train.lua
```

実際の開発では、ホストでファイルへの変更を繰り返し、コンテナー内でトレーニング スクリプトを実行します。

8. オプション: ファイルを編集し、変更時に次の手順を実行します。

9. トレーニング スクリプト (**run-devel.sh**) を実行します。

```
nvidia-docker run --rm -ti -v $PWD:/source -v
/raid/datasets:/datasets nv/pix2pix-torch:devel ./train.sh
```

8.5.1. 例 4.1: ソースをコンテナーにパッケージ化する

モデル定義とスクリプトをコンテナーにパッケージ化するのは非常に簡単で、**COPY** ステップを Dockerfile に追加するだけです。

ボリューム マウントをドロップし、コンテナー内にパッケージ化されているソースを使用するように実行スクリプトを更新しました。内部コードが修正されたため、パッケージ化されたコンテナーは **devel** コンテナー イメージよりもはるかに移植しやすくなりました。このコンテナー イメージのバージョンは、特定のタグを使用して管理し、コンテナー レジストリに格納することをお勧めします。

コンテナーを実行する更新も、ローカル ソースのコンテナーへボリューム マウントをドロップするだけで済みます。

第 9 章
トラブルシューティング

nvidia-docker のコンテナーの詳細は、GitHub サイト (NVIDIA-Docker GitHub (英語)) をご覧ください。

ディープラーニング フレームワークのリリース ノート (英語) およびその他の製品資料については、ディープラーニング ドキュメントの Web サイト (「ディープラーニング フレームワークのリリース ノート (英語)」) をご覧ください。

通知

このガイドの情報およびこのガイドで参照する NVIDIA ドキュメントに含まれる他のすべての情報は、「現状有姿」で提供されます。NVIDIA は製品に関する情報について、明示または黙示、あるいは法定または非法定にかかわらず保証しません。さらに、特定の目的に対する黙示的保証、非抵触行為、商品性、および適正すべてに対する責任を明示的に否認します。お客様が何らかの理由で被るいかなる損害にかかわらず、NVIDIA がこのガイドに記載される製品に関してお客様に対して負う累積責任は、本製品の販売に関する NVIDIA の契約条件に従って制限されるものとします。

このガイドで説明されている NVIDIA 製品はフォールト トレラント (耐障害性) ではないため、その使用やシステムの失敗が死亡、重大な身体傷害、または物的損害が生じるような状況 (核、航空電子工学、生命維持、またはその他の生命維持に不可欠な用途など) をもたらすあらゆるシステムの設計、構築、保全、および運用に使用するように設計、製造、または意図されていません。NVIDIA は、そのような危険度の高い使用への適合性に対する明示的または黙示的な保証を明確に否認します。NVIDIA は、そのような危険度の高い使用から生じるいかなる請求または損害賠償にも、その全部または一部に対して、お客様または第三者に責任を負わないものとします。

NVIDIA は、このガイドで説明されている製品が追加的なテストや修正を行わずに特定の用途に適合することを表明するものでも、保証するものでもありません。各製品のすべてのパラメーターのテストが NVIDIA によって実行されるとは限りません。お客様によって計画された用途への製品の適合性を確認し、用途または製品の不履行を避けるために必要なテストを実施することは、お客様側の責任です。お客様の製品設計に含まれる欠点は、NVIDIA 製品の品質および信頼性に影響する可能性があり、その結果、このガイドには含まれていない追加的あるいは異なる条件や要件が生じる可能性があります。NVIDIA は、次に基づく、またはそれに起因する一切の不履行、損害、コスト、あるいは問題に対しても責任を負いません。(i) このガイドに違反する方法で NVIDIA 製品を使用すること (ii) お客様の製品設計。

このガイドの製品に関する情報をお客様が使用する権利を除き、明示的か黙示的かを問わず、このガイドに基づいて、他のいかなるライセンスも NVIDIA によって付与されないものとします。このガイドに含まれる情報を複製することは、複製が NVIDIA によって書面で承認されており、改変なしで複製されており、かつ、関連するあらゆる条件、制限、および通知を伴っている場合に限り許可されます。

商標

NVIDIA、NVIDIA のロゴ、Volta は、米国およびその他の国における NVIDIA Corporation の商標または登録商標です。

Docker と Docker のロゴは、米国またはその他の国における Docker, Inc. の商標または登録商標です。

その他の社名ならびに製品名は、関連各社の商標である可能性があります。

Copyright

www.nvidia.co.jp