

# Vers une Bioinformatique plus reproductible avec Apptainer

BioinfoDiag 2025

Céline Mandier  
*Ingénieure en Bioinformatique*



Projet cofinancé par le Fonds Européen Agricole pour le Développement Rural  
L'Europe investit dans les zones rurales

# Et si on faisait connaissance ?

## Céline Mandier

- Ingénieure en Bioinformatique à l'ISDM depuis 2024.
- Mes missions :
  - Aider
  - Former
  - Animer



Tout ça avec l'aide d'une super équipe !

# Sommaire

1 Petit récapitulatif

2 Fonctionnement

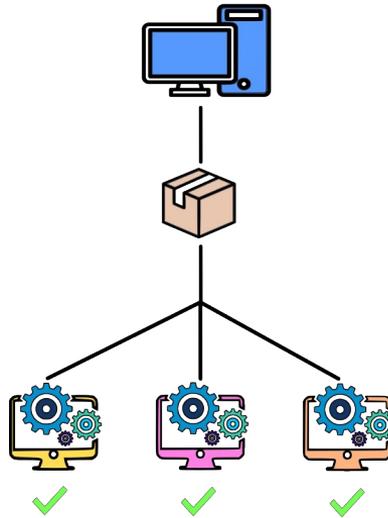
3 Cas d'usage

4 + / -

5 Conclusion

# 1. Petit récapitulatif

- ▶ **Problème** : compatibilité ou version empêchant un logiciel de fonctionner
- ▶ **Solution** : les conteneurs, rapides et efficaces pour l'exécution d'application



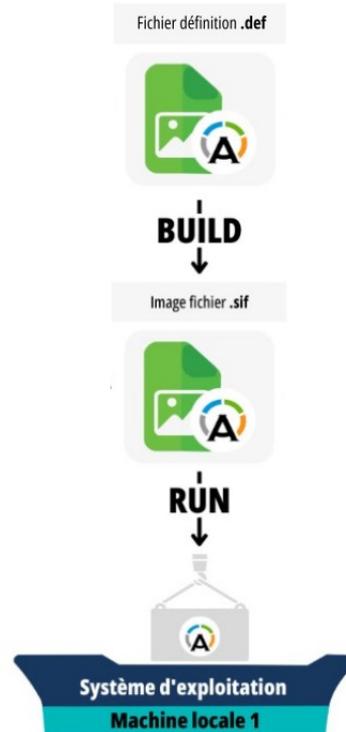
# 1. Petit récapitulatif

## *Pourquoi utiliser Apptainer / Singularity ?*

- Pas besoin d'accès root
- Conçu pour le HPC
- Format immuable
- Conversion des images Docker
- Facilité d'utilisation



## 2. Fonctionnement



## 2. Fonctionnement

**Recette** : est un fichier statique (.def) qui regroupe les informations sur les installations des logiciels, des variables d'environnement, les fichiers à ajouter et les métadonnées du conteneur.

Elle se découpe en deux parties :

- en-tête,
- section,

## 2. Fonctionnement

En-tête

```
# distribution based on: ubuntu 22.04
Bootstrap:docker
From:ubuntu:22.04

# container for R version 4.1.2
# Build:
# sudo aptainer build --bind output:/mnt r_base_bydef.sif r_base_bydef.def
```

Sections

```
%files
    output /output

%post
    #essential stuff but minimal
    apt update
    #for security fixe:
    apt upgrade -y

    #apt -y update \
    #DEBIAN_FRONTEND=noninteractive apt -y upgrade \
    apt install -y nano \

    DEBIAN_FRONTEND=noninteractive apt install -y r-base \

    R -e "install.packages(c('ggplot2', 'mgcv', 'FNN', 'reshape2'), repos = c(CRAN = 'https://cloud.r-project.org'))"

%runscript
Rscript "$@"
```

## 2. Fonctionnement

**Image** : est un fichier statique (.sif) immuable qui contient tout ce qu'il faut pour exécuter une application / programme. Cela inclut le code du programme, les bibliothèques, les dépendances, les fichiers de configuration.

Caractéristiques d'une image :

- une image peut fournir plusieurs fois le même conteneur en parallèle,
- elles peuvent être stockées et être partagées via des registres,
- il est possible d'utiliser une image existante pour en créer une nouvelle.

## 2. Fonctionnement

Construction d'une image



**Commande type :**

```
$ aptainer build [nom_image].sif [nom_fichier_def]
```

```
$ singularity build [nom_image].sif [nom_fichier_def]
```

**Exemple :**

```
$ aptainer build python.sif python.def
```

## 2. Fonctionnement

Construction d'une image



**Commande type :**

```
$ aptainer run [nom_image].sif
```

```
$ singularity run [nom_image].sif
```

**Exemple :**

```
$ aptainer run python.sif
```

## 2. Fonctionnement

### Construction d'une image

```
(base) cmandier@ISDMPC:~$ cd test_apptainer/Python_case/  
(base) cmandier@ISDMPC:~/test_apptainer/Python_case$ vi py_case.d
```

## 2. Fonctionnement

Le mode --sandbox

- ▶ Le mode **--sandbox** d'Apptainer permet de créer un conteneur sous forme d'un répertoire modifiable.
- ▶ Dans quelles conditions l'utiliser ?
  - Pour tester et modifier un conteneur avant de le figer
  - Est très utile lors du développement et le débogage
  - Cependant, il est plus lourd qu'une image .sif, moins sécurisé et complique la distribution

## 2. Fonctionnement

### Le mode --sandbox

```
(base) cmandier@ISDMPC:~$ cd test_apptainer/  
(base) cmandier@ISDMPC:~/test_apptainer$ |
```

## 2. Fonctionnement

Récupération d'une image existante



**Commande type :**

```
$ aptainer pull [nom_image].sif [url_image]
```

```
$ singularity pull [nom_image].sif [url_image]
```

**Exemple :**

```
$ aptainer pull python.sif docker://python:3.9
```

## 2. Fonctionnement

### Récupération d'une image existante

```
(base) cmandier@ISDMPC:~$ cd test_apptainer/  
(base) cmandier@ISDMPC:~/test_apptainer$
```

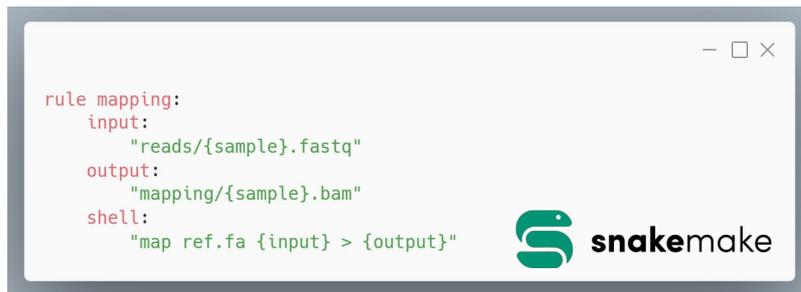
### 3. Cas d'usage

Snakemake : manager de workflow

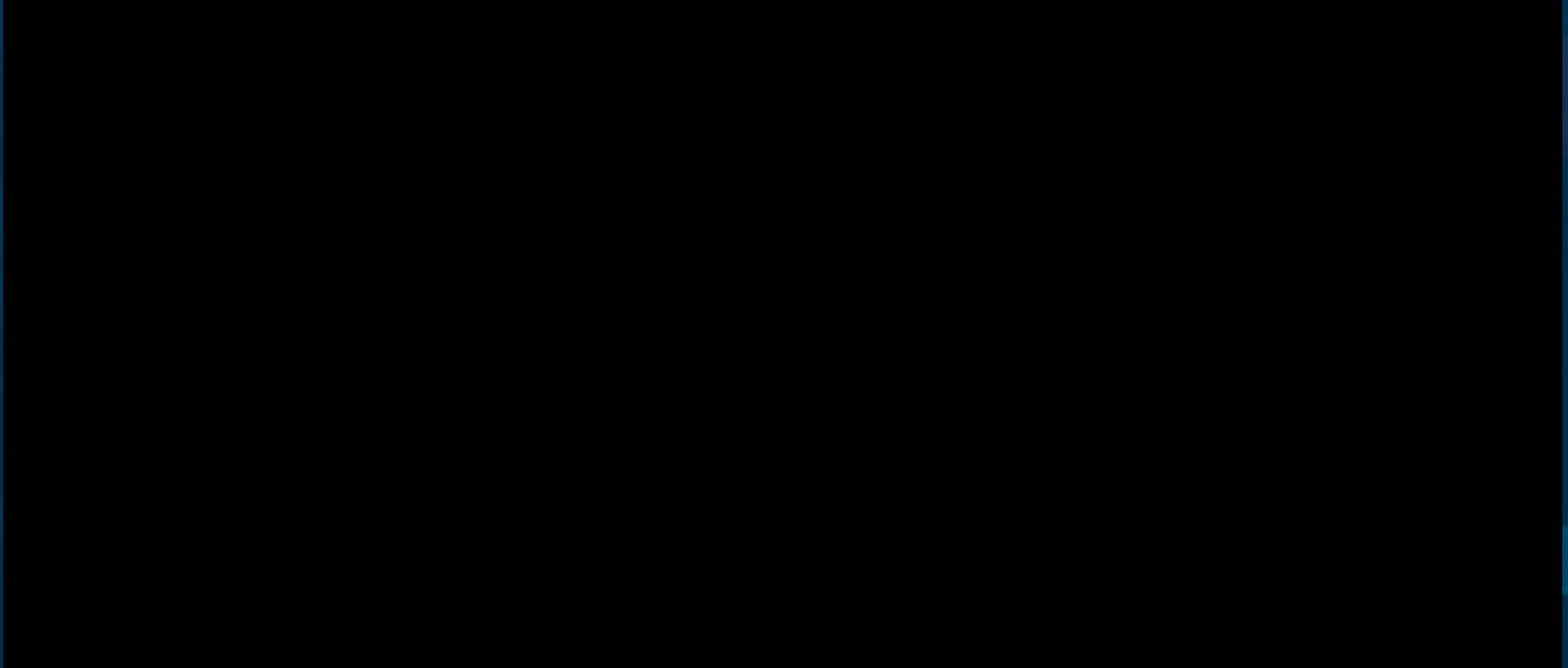
- ▶ Snakemake est un outil de gestion de workflows inspiré de Make. Il permet d'automatiser l'exécution de pipelines en définissant des règles sous forme de fichiers Snakefile.

- Reproductibilité des analyses
- Gestion efficace des ressources
- Intégration facile avec des conteneurs

```
rule mapping:
  input:
    "reads/{sample}.fastq"
  output:
    "mapping/{sample}.bam"
  shell:
    "map ref.fa {input} > {output}"
```



### 3. Cas d'usage



## 4. Avantages et inconvénients

- ✓ Sécurité renforcée
- ✓ Compatibilité HPC
- ✓ Format .sif immuable
- ✓ Facilité de portabilité
- ✓ Isolation optimisée
- ✗ Moins flexible pour le développement
- ✗ Images .sif en lecture seule
- ✗ Moins d'écosystème et d'outils
- ✗ Taille des images



*Les conteneurs comme Apptainer et Docker partagent l'OS hôte, limitant l'isolation totale et pouvant impacter la reproductibilité des résultats à long terme.*



## 5. Conclusion

- **Apptainer** est une solution puissante pour la gestion des environnements logiciels en calcul scientifique notamment en Bioinformatique.
- Cependant, la reproductibilité peut être affecté sur le long termes.
- Une solution complémentaire a été proposé : **GUIX**

Merci de votre attention

# ISDM

INSTITUT DE SCIENCE DES DONNÉES  
MONTPELLIER



UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER **Inserm**



**DROCC**

DATACENTER RÉGIONAL OCCITANIE



RÉPUBLIQUE  
FRANÇAISE

Liberté  
Égalité  
Fraternité



montpellier  
Méditerranée  
métropole



Contrats de plan  
ÉTAT-RÉGION



FRANCE  
2030

**anr**<sup>®</sup>  
agence nationale  
de la recherche

L'EUROPE S'ENGAGE  
L'OCCITANIE AGIT



Projet cofinancé par le Fonds Européen Agricole pour le Développement Rural  
L'Europe investit dans les zones rurales

# RÉFÉRENCES

<https://apptainer.org/>

<https://sylabs.io/singularity/>

<https://snakemake.readthedocs.io/en/stable/>

<https://guix.gnu.org/fr/>

<https://isdm.umontpellier.fr/mesolr/>