Rockin' in the free world

Entornos reproducibles para R con Docker

Jose Manuel Vera Oteo

24 de Octubre de 2017

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- **"No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."**

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- "No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."
- **"En windows."**

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- "No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."
- "En windows."
- **"¿Pasarlo a producción? ¿todo igual?"**

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- "No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."
- "En windows."
- "¿Pasarlo a producción? ¿todo igual?"
- **"PC nuevo? Estupendo!"**

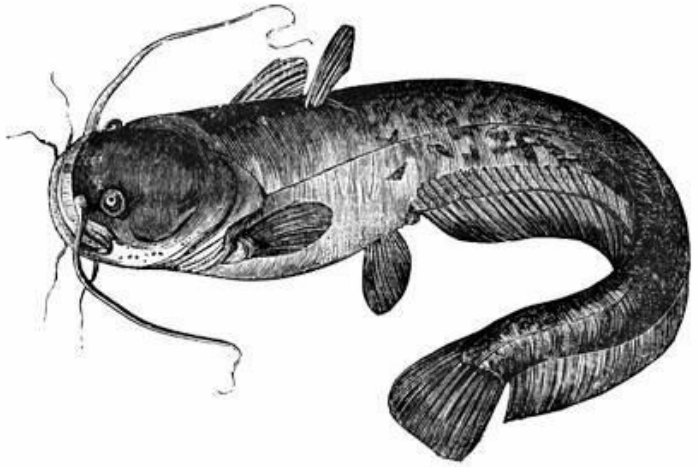
La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- "No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."
- "En windows."
- "¿Pasarlo a producción? ¿todo igual?"
- "PC nuevo? Estupendo!"
- **"Entornos compartidos."**

La vida de un usuario de R

- "Nuevo proyecto."
- "No recuerdo cómo instalé aquella librería que necesito para este paquete."
- "Es que en windows es muy complicado (o no funciona)."
- "¿Pasarlo a producción?. Claro. Muy fácil…(caveats)"
- "PC nuevo? Estupendo!"
- "Entornos compartidos."
- **Desarrollo en otra plataforma.**
- **….y la excusa favorita……**

How to convince your manager



Works on my machine

The Definitiva Guide

O RLY?

R. William

Soluciones habituales

- **Usamos máquinas virtuales**

De gran tamaño, es muy complicado mover de un sitio a otro y además tienen requerimientos de computación exagerados. Es necesaria mucha memoria y CPU.

Soluciones habituales

- Usamos máquinas virtuales
- **Guardamos Imágenes del disco**

Mismo problema que las máquinas virtuales pero magnificado. Las plantillas se quedan obsoletas y hay que actualizarlas cada cierto tiempo.

Soluciones habituales

- Usamos máquinas virtuales
- Guardamos Imágenes del disco
- **Lo documentamos *TODO*.**

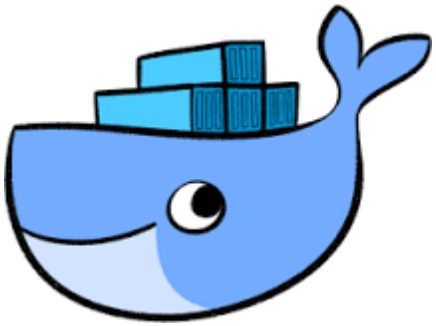
Soluciones de R

Algunos paquetes o el mismo Rstudio intentan paliar el problema o alguna de sus partes:

- **Packrat**
- **checkpoint**
- **minicran**
- **mran Time machine**

Seguimos sin solucionar el problema. Son soluciones a posteriori.

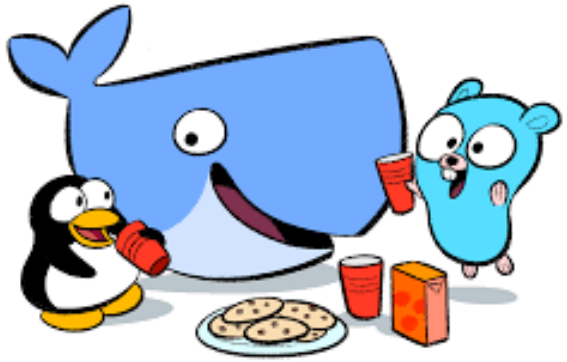
¿Qué es Docker?



Wikipedia:

"Docker es un proyecto de código abierto que automatiza el despliegue de aplicaciones dentro de contenedores de software, proporcionando una capa adicional de abstracción y automatización de Virtualización a nivel de sistema operativo en Linux.

¿Qué es Docker?

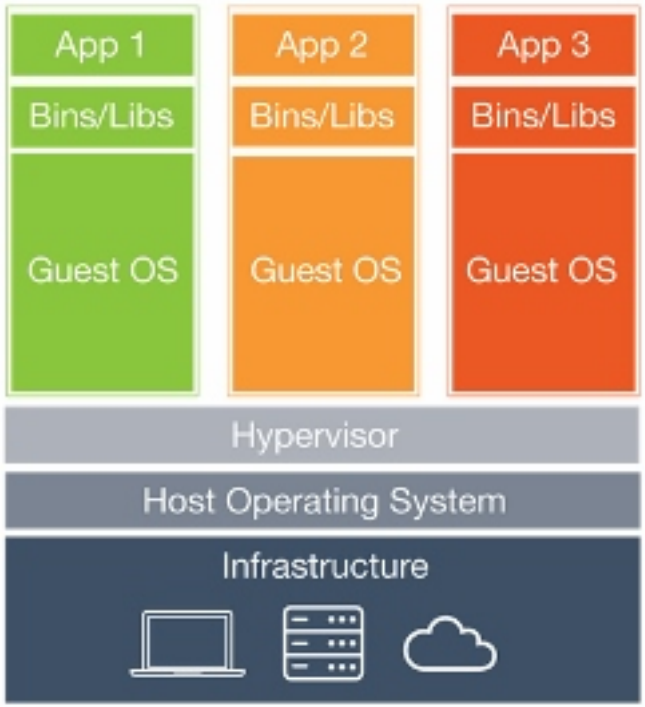


¿Qué es? (muy resumido):

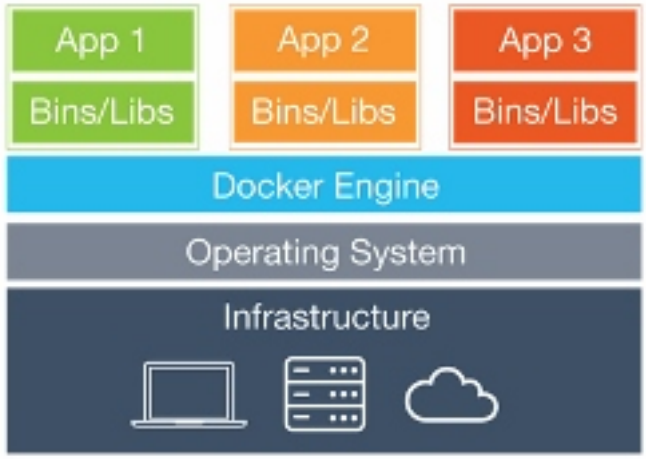
"Lo bueno de la máquina virtual sin lo malo de la máquina virtual"

Aprovechando toda la potencia de linux sólo se virtualiza lo que se necesita. Del resto se encarga el sistema anfitrión.

Docker vs. Máquina Virtual



Virtual Machines



Containers

¿Linux?

¿Se puede usar en Windows (o Mac OS)?

Si. Se puede usar en Windows, Mac OS o Linux. Existen instaladores para los 3 sistemas.

- Microsoft Hyper-V 64bit Windows 10 Pro, Enterprise / Education

En Mac OS, Yosemite 10.10.3 o superior. - procesadores 64 Bits, - 4 GB RAM minimo.

Siempre recomendable usar Linux (no solo para Docker, sino en general)

Ventajas

- **Aislamiento**

No dependen del hardware ni del sistema operativo host.

Ventajas

- Aislamiento
- **Portabilidad**

Permiten mover de manera muy rápida y fácilmente el software de una máquina a otra.

Ventajas

- Aislamiento
- Portabilidad
- **Sencillez**

Su uso es relativamente sencillo. Basta conocer 5 ó 6 comandos y unas nociones muy básicas. Luego si queremos podemos profundizar (y hay mucho jardín donde meterse).

Ventajas

- Aislamiento
- Portabilidad
- Sencillez
- **Muy popular**

Cada vez más usado, nos permite acceder a muchísima documentación o ayuda de manera sencilla. En parte se maneja como un repositorio distribuido tipo GIT. Además hay imágenes para casi todo lo que nos imaginemos.

Conceptos básicos

- **Contenedor**

Es la parte activa con la que interactuamos. "Hace cosas".

Conceptos básicos

- Contenedor
- **Imagen**

La plantilla en la que se basa el contenedor para saber lo que tiene que hacer.

Conceptos básicos

- Contenedor
- Imagen
- **Registro**

Repositorio en el cual de manera abierta se ponen a disposición las imágenes. Uno de los más conocidos y usados es "Docker Hub".

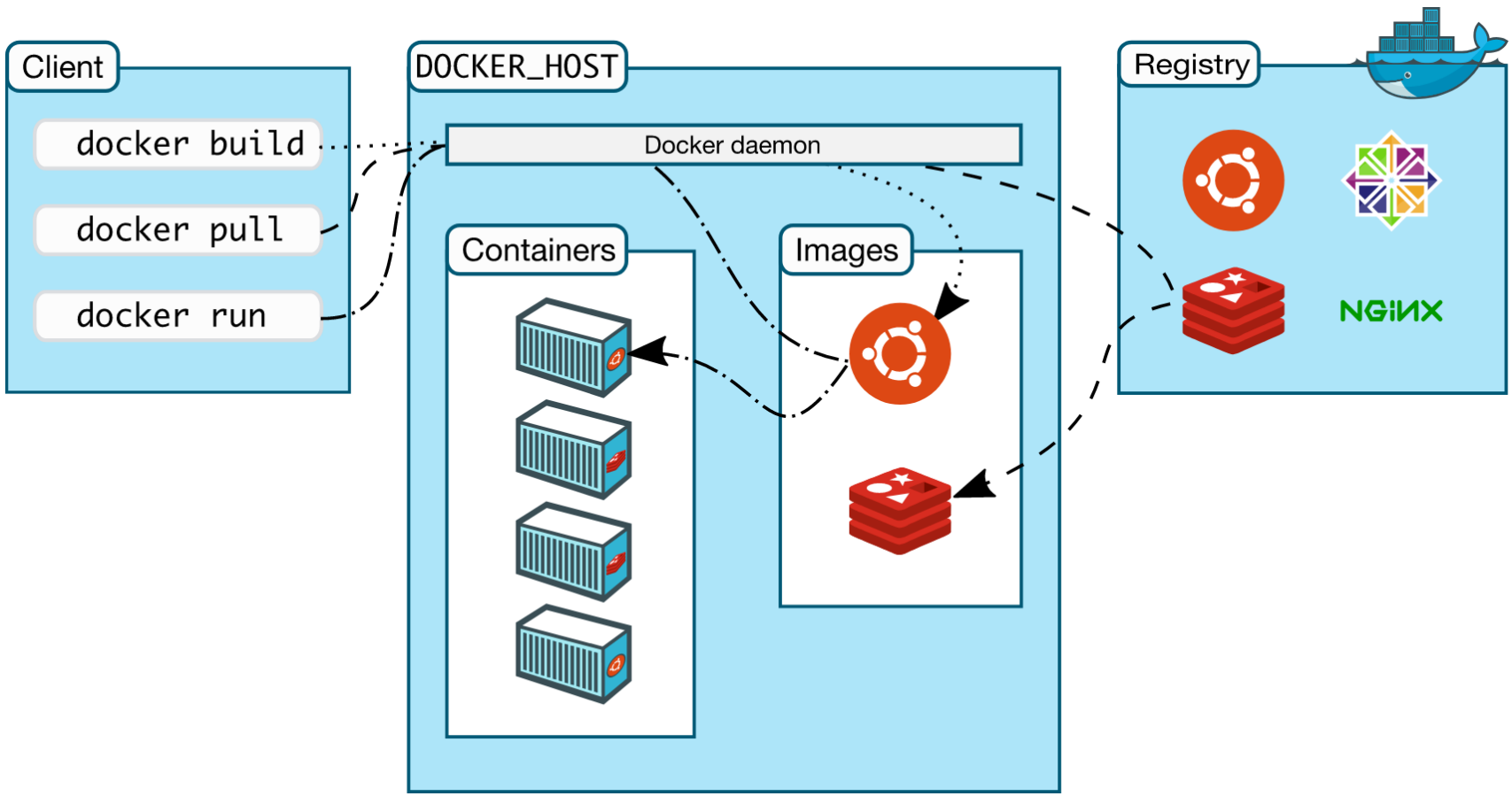
https://hub.docker.com/

Conceptos básicos

- Contenedor
- Imagen
- Registro
- **Dockerfile**

Es la *"receta"* para construir una imagen desde cero.

Arquitectura



¿Funciona para R?

Entre otras muchas cosas.

Existen imagenes para *casi* todo. "todas"" las distribuciones Linux (Ubuntu , CentOS, Debian), entornos de base de datos, tanto **No Sql** (Redis, MongoDB, Cassandra) como **Si Sql** (Mysql, postgreSQL), entornos de programación, servicios de todo tipo….

Recomendación: usar imágenes *"oficiales"*

https://hub.docker.com/explore/

¡Let's Rocker!

 Carl Boettiger (knitcitations, EML, RNeXML….)

 Dirk Eddelbuettel (Rcpp, RcppArmadillo, RcppEigen, digest…)

mantienen **Rocker**, un repositorio muy completo con diferentes versiones de R.

http://www.carlboettiger.info/

http://dirk.eddelbuettel.com/

Rocker sites

En github:

https://github.com/rocker-org/rocker

En Docker Hub:

https://hub.docker.com/u/rocker/

¡Empieza el baile! (comandos básicos)

Buscar/Obtener una imagen

```
docker search rstudio
docker pull rocker/rstudio
```

Generar un contenedor a partir de la imagen

```
docker run --rm -p 8787:8787 --name="test" -v ~/dockerdata/:/data rocker/rstudio
```

```
docker run -d -p 8787:8787 rocker/rstudio:3.2.0
```

Conectar con Rocker

```
localhost:8787
```

Login


RStudio
Sign in to RStudio
Username:
rstudio
Password:
rstudio
Stay signed in
Sign In

¿Dónde están los datos?

Otro concepto básico: **Volúmenes**

Los volúmenes son puntos de montaje que asociamos a un contenedor. Mapeados contra un directorio de nuestro sistema anfitrión nos permite tener acceso a su contenido.

- En windows

```
docker run --rm -it p 8787:8787 -v \
C://Users/miusuario/Documents/Docker:/srv/shiny-server 6dc473697f85
```

- En Linux (más fácil, por supuesto)

```
docker run --rm -it p 8787:8787 -v /home/data:/data 6dc473697f85
```

Más comandos útiles

- docker images

REPOSITORY	TAG	IMAGE ID	CREATED	SIZE
rocker/shiny	latest	682eb5fda1f3	12 days ago	1.23 GB
trescuatrodos	latest	fbac184a48f6	2 weeks ago	4.52 GB
trescuatro	latest	7781ee1f031f	2 weeks ago	4.5 GB
jvera/tidyviz	latest	3930c226a472	2 weeks ago	4.54 GB
rocker/ropensci	latest	8bf0948db340	2 weeks ago	3.46 GB
rocker/tidyverse	latest	83f91871d62f	3 weeks ago	1.56 GB
ubuntu	latest	f7b3f317ec73	4 weeks ago	117 MB
rocker/rstudio	latest	a3f43bf49425	2 months ago	990 MB
hello-world	latest	48b5124b2768	4 months ago	1.84 kB
d4w/nsenter	latest	9e4f13a0901e	8 months ago	83.8 kB

Más comandos útiles

- docker ps [-a]
- docker images (lista las imagenes)
- docker build (construye un contenedor con un Dockerfile)
- docker rmi nombre/id (borra la imagen)
- docker stop (para el contenedor)
- docker rm nombre/id (borra el contenedor)
- docker system prune (limpia el sistema)
- docker commit (guarda los cambios del contenedor)

¡Cuidado!

Si no se guardan los cambios el contenedor vuelve al estado inicial.
Pero…

es mejor usar el Dockerfile

```
---------------------
FROM rocker/rstudio:latest

RUN apt-get update -qq && apt-get -y --no-install-recommends install \
  libxml2-dev \
  libcairo2-dev \
  libpq-dev \
  libudunits2-dev \
  && . /etc/environment \
  && install2.r --error \
    devtools tidyverse ggplot2 profvis formatR \
    remotes rio validate MASS magrittr

RUN Rscript -e 'devtools::install_github("smach/rmiscutils")'
RUN rm -rf /tmp/downloaded_packages/
--------------------
```

Con la canción empezada

http://o2r.info/2017/05/30/containerit-package/

Podemos generar un Dockerfile con nuestras sesiones de trabajo.

```
devtools::install_github("r-hub/sysreqs")

devtools::install_github("o2r-project/containerit")

library(containerit)

dockerfile_object <- dockerfile()

print(dockerfile_object)
```

Con la canción empezada

```
FROM rocker/r-ver:3.4.0
LABEL maintainer="jvera"
RUN export DEBIAN_FRONTEND=noninteractive; apt-get -y update \
 && apt-get install -y libcurl4-openssl-dev \
    libpq-dev \
    libssl-dev \
    make \
    pandoc \
    pandoc-citeproc \
    zlib1g-dev
 RUN ["install2.r", "-r 'https://cloud.r-project.org'", "anytime", "Hmisc", "ggplot2",
 RUN ["installGithub.r", "krlmlr/here@efd50cb", "krlmlr/rprojroot@6d1069c"]
 WORKDIR /payload/
 CMD ["R"]
```

Recomendaciones para el Dockerfile

- Limitar el numero de capas.

Recomendaciones para el Dockerfile

- Limitar el numero de capas.
- **1 Contenedor, 1 función**.

Recomendaciones para el Dockerfile

- Limitar el numero de capas.
- 1 Contenedor, 1 función.
- **No incluir datos. Los datos "viven" fuera de los contenedores.**

Recomendaciones para el Dockerfile

- Limitar el numero de capas.
- 1 Contenedor, 1 función.
- No incluir datos. Los datos "viven" fuera de los contenedores.
- **Aunque hay contenedores de datos**.

Consejos generales

- Atentos al disco duro sobre todo al principio.

Consejos generales

- Atentos al disco duro sobre todo al principio.
- **Comparte las imagenes. Tu trabajo puede ser útil para alguien.**

Consejos generales

- Atentos al disco duro sobre todo al principio.
- Comparte las imagenes. Tu trabajo puede ser útil para alguien.
- **No reinventar la rueda, aprovecharse de los miles de imágenes que hay.**

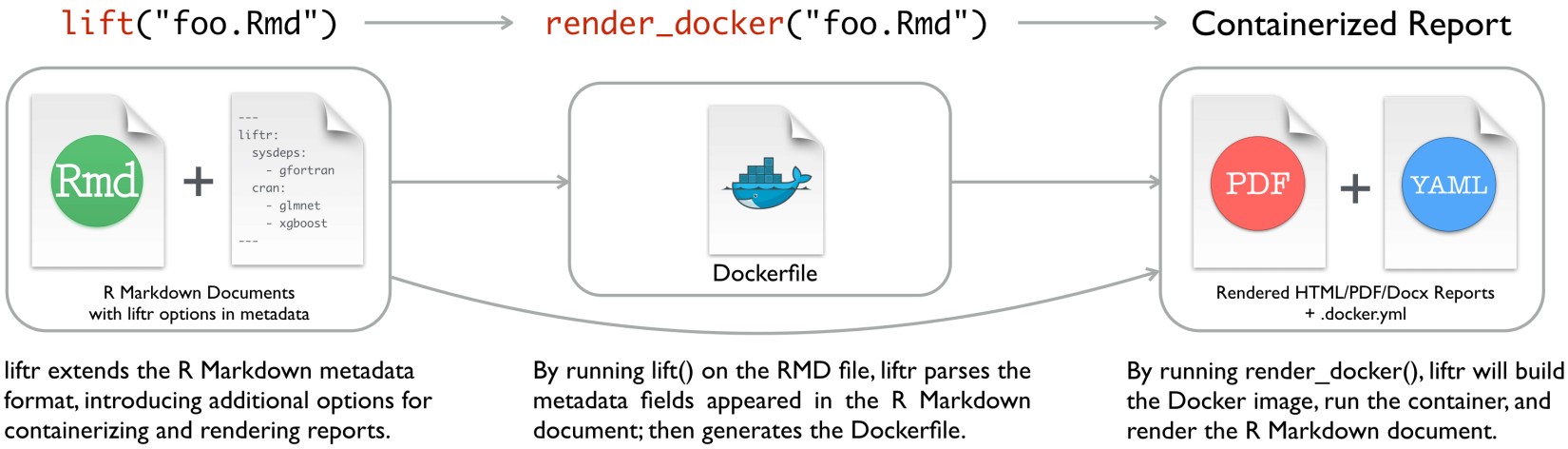
Consejos generales

- Atentos al disco duro sobre todo al principio.
- Comparte las imagenes. Tu trabajo puede ser útil para alguien.
- No reinventar la rueda, aprovecharse de los miles de imágenes que hay.
- **Estad atentos. El proyecto evoluciona muy/demasiado rápido.**

Por ejemplo:

liftr: paquete R que permite levantar un contenedor con el entorno definido para un reporting automatizado (2017-09-29)

https://liftr.me/



Consejos generales

- Atentos al disco duro sobre todo al principio.
- Comparte las imagenes. Tu trabajo puede ser útil para alguien.
- No reinventar la rueda, hay miles de imágenes.
- Estad atentos. El proyecto evoluciona muy/demasiado rápido.
- **NUNCA para sistemas críticos en producción.**

Cosas (un poco) avanzadas: Rock con Orquesta

- *Machine*: Despliegue rápido de motores de Docker en cloud/local.
- *Swarm*: clusters de contenedores. Varios motores docker como uno solo.
- *Compose*: aplicaciones multicontenedor.
- *Kubernetes*: Orquestación
- *CoreOS*: Sistema operativo dedicado para aplicaciones basadas en contenedores

Enlaces

https://github.com/veggiemonk/awesome-docker

https://github.com/wch/harbor

http://o2r.info/2016/12/15/investigating-docker-and-R/

https://cran.r-project.org/web/packages/liftr/vignettes/liftr-intro.html

http://seankross.com/2017/09/17/Enough-Docker-to-be-Dangerous.html

https://github.com/PRL-PRG/docker-r-full-base

https://travis-ci.org/

https://thehftguy.com/2016/11/01/docker-in-production-an-history-of-failure/

Algunas imágenes interesantes

appsecco/data-science-toolbox

kaggle/rstats

kaggle/julia

kaggle/python

/r/rocker/ropensci/

Jupyter: https://www.dataquest.io/blog/docker-data-science/

Notas finales

- **Rapidez y utilidad**.

Muy útil para el desarrollo. Ahorra mucho tiempo en configuraciones.
Con una pequeña inversión inicial de tiempo los beneficios son tangibles.

- **Compartir**.

Desplegar desde cualquier lugar con los registros y los Dockerfiles.
Repositorio común de configuraciones para diferentes funcionalidades.

- **Multiplataforma**.

Desarrollo desde cualquier plataforma origen para cualquier plataforma destino.

- **NUNCA** aplicaciones críticas en producción. (de momento)

Gracias!

Twitter: @verajosemanuel

DockerHub: https://hub.docker.com/u/jvera/

Blogdown: http://jvera.rbind.io