

# Análise do Sobrecusto de Utilização de Contêineres para Execução de Aplicações de HPC na Nuvem

Livia Ferrão<sup>1</sup>, Vanderlei Munhoz<sup>1</sup>, Márcio Castro<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Laboratório de Pesquisa em Sistemas Distribuídos (LaPeSD)  
Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) - Florianópolis/SC

livia.ferrao@grad.ufsc.br, vanderlei.filho@posgrad.ufsc.br,  
marcio.castro@ufsc.br

**Resumo.** *A orquestração de contêineres em ambientes de computação em nuvem tem se tornado cada vez mais popular nos últimos anos. O presente trabalho visa avaliar o desempenho de aplicações HPC em contêineres executados na nuvem. Com esse objetivo, foi realizada uma comparação de performance entre a tecnologia de contêiner denominada Singularity e o ambiente nativo da AWS por meio de programas paralelizados com MPI.*

## 1. Introdução

A computação em nuvem permite o acesso sob demanda a recursos computacionais que são liberados rapidamente com o mínimo de esforço de gerenciamento ou interação com o provedor de serviços. Ao mesmo tempo, poupa espaço e capacidade de processamento nos dispositivos do usuário. Plataformas que provêm esse tipo de serviço são conhecidas como nuvens públicas [Mell and Grance 2011]. As nuvens públicas estão se tornando uma alternativa viável aos *clusters* locais para a execução de aplicações HPC [Netto et al. 2018]. Além de permitir cargas de trabalho flexíveis e escaláveis, esse ambiente pode ajudar a reduzir os custos de capital associados à infraestrutura “*on-premise*”, evitando a necessidade de investimentos volumosos e arriscados [Saini and Sainis 2021].

Todavia, há uma falta de ferramentas de *software* que auxiliem tanto na configuração dos ambientes na nuvem, quanto na migração e execução de aplicações HPC, que são geralmente escritas para execução em *hardware* especializado e de difícil portabilidade. Para solucionar um destes problemas, pode ser utilizada a tecnologia de contêineres, que traz benefícios importantes para a portabilidade e já vem sendo usada no contexto de HPC há alguns anos. Entretanto, o seu sobrecusto ainda é pouco analisado quando usado em nuvens computacionais públicas.

O presente trabalho busca analisar o sobrecusto do uso de contêineres para execução de aplicações de HPC em provedores de nuvem pública e realizar a extensão da ferramenta HPC@Cloud<sup>1</sup> para dar suporte ao uso de contêineres Singularity. O sobrecusto do uso de contêineres está sendo medido através da análise dos tempos de execução de aplicações do *NAS Parallel Benchmarks* [Bailey et al. 1991]. Os resultados mostram que o desempenho permanece bem próximo do ambiente nativo da nuvem.

O trabalho está organizado da seguinte forma. Na Seção 2 é apresentada a fundamentação teórica do trabalho. Na Seção 3 é descrito o suporte de contêineres proposto para a ferramenta HPC@Cloud. Na Seção 4 é detalhado o ambiente experimental e apresenta os resultados obtidos. Por fim, as conclusões seguidas de trabalhos futuros são apresentadas na Seção 5.

---

<sup>1</sup><https://github.com/lapesd/hpcac-toolkit>

## 2. A Ferramenta HPC@Cloud

A ferramenta HPC@Cloud é um *software* de código aberto<sup>2</sup> em desenvolvimento composto principalmente por uma interface de linha de comando para facilitar a construção de *clusters* virtuais para HPC. A infraestrutura alvo consiste em provedores de nuvem pública, com otimizações para a execução de aplicações MPI. A ferramenta atualmente possui suporte para os provedores Amazon Web Services (AWS) e Vultr Cloud, incluindo a capacidade de construir *clusters* do tipo *spot* na AWS [Munhoz and Castro 2022].

A ferramenta é construída sobre as tecnologias já estabelecidas no mundo da computação em nuvem, sobretudo o HashiCorp Terraform, que permite a definição e o controle rígido e simples de recursos de computação em nuvem. A funcionalidade essencial da ferramenta permite que arquivos em linguagem *HashiCorp Configuration Language* (HCL) sejam gerados e parâmetros definidos pelo usuário sejam injetados, trazendo prontas as definições de todos os recursos necessários para construir um *cluster* otimizado para aplicações HPC. Imagens e *snapshots* de máquinas virtuais previamente construídas também são disponibilizados para acelerar a construção da infraestrutura e reduzir custos, dado que os provedores passam a faturar o usuário assim que as máquinas estão acessíveis pela Internet.

## 3. Suporte para Contêineres na Ferramenta HPC@Cloud

O suporte para execução de contêineres na ferramenta HPC@Cloud é feito com uso da plataforma Singularity, a qual é muito utilizada no contexto de HPC. Ela provê um ambiente de execução para contêineres com suporte a *Message Passing Interface* (MPI) [Veiga et al. 2019]. Diferentemente de ferramentas similares, o Singularity foi criado para permitir execução sem acesso a privilégios administrativos (*root*), o que ajuda a garantir segurança e isolamento superior ao sistema. Além disso, as imagens do Singularity são armazenadas como um único arquivo, tornando-as facilmente compartilháveis.

Para dar suporte a execução com contêineres na ferramenta HPC@Cloud, foram adicionados novas opções de parametrização para a geração dos arquivos HCL, dando ao usuário a opção de injetar ou não as dependências necessárias nas máquinas de seu *cluster* na nuvem. A injeção das dependências é feita a através da execução de um *shell script* com instruções para instalação do Singularity e do MPI a partir de seus códigos-fonte, sendo este último configurado para que a execução de aplicações containerizadas seja compatível com o ambiente.

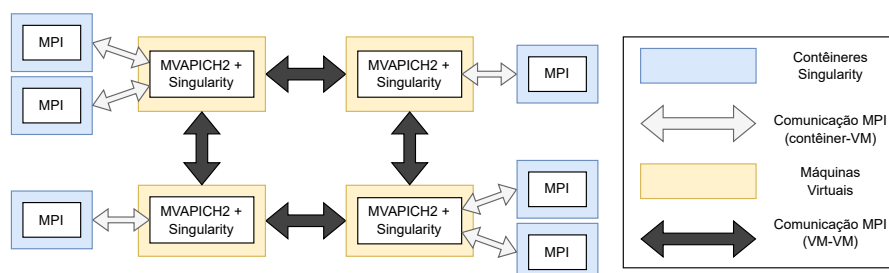
Foi escolhida a distribuição MVAPICH2<sup>3</sup> do MPI, principalmente devido ao suporte nativo ao Singularity. As instalações do MVAPICH2 e do Singularity são realizadas de forma a permitir a comunicação no modelo híbrido. A abordagem híbrida é descrita na Figura 1 e baseia-se no uso de distribuições da biblioteca MPI tanto nas máquinas virtuais quanto nos contêineres a serem executados. A abordagem híbrida foi escolhida dada a sua extrema flexibilidade e portabilidade, sendo que as distribuições MPI podem até mesmo ser diferentes desde que sejam compatíveis.

Nota-se que contêineres não se comunicam diretamente, delegando às máquinas hospedes essa função, que já é configurada de maneira separada e por padrão pela ferramenta HPC@Cloud. Para executar uma aplicação, o usuário deve fornecer uma definição de imagem de contêiner Singularity na forma de um arquivo de extensão *.def*, com instruções para compilação ou executável pronto do programa alvo. A distribuição MPI nos contêineres pode ser qualquer uma compatível com as versões mais recentes do MVA-PICH2.

---

<sup>2</sup><http://github.com/lapesd/hpcac-toolkit>

<sup>3</sup><http://mvapich.cse.ohio-state.edu>



**Figura 1. Visão do modelo híbrido adotado na ferramenta HPC@Cloud para execução de aplicações MPI em contêineres Singularity na nuvem.**

## 4. Resultados Experimentais

### 4.1. Ambiente de Execução e Métricas Analisadas

Para a avaliação do desempenho, foram utilizados três aplicações do *NAS Parallel Benchmarks*: O *Integer Sort* (IS), que executa uma ordenação entre um conjunto esparsos de números inteiros com *bucket sort*; o *Embarrassingly Parallel* (EP), que é uma aplicação com alto grau de paralelismo; e o *Fast Fourier Transformation* (FT), que mede a transformação de Fourier rápida 3D discreta [Bailey et al. 1991]. As aplicações IS e FT possuem uma grande comunicação entre processos, e a aplicação EP é facilmente dividida em tarefas independentes executadas simultaneamente. Cada aplicação possui diferentes classes de tamanho de problemas. A classe B foi escolhida por apresentar um tempo de execução compatível com a capacidade de processamento das máquinas utilizadas.

Todos os experimentos foram realizados em instâncias da AWS EC2. Os *clusters* virtuais construídos para os experimentos possuem 4 instâncias *t2.xlarge* (16 GB de memória e 4 vCPUS cada). A imagem base utilizada para gerar as máquinas virtuais foi a *Amazon Linux 2 AMI (HVM) - Kernel 5.10, SSD Volume Type*. Toda a comunicação MPI foi realizada via TCP/IP, dado que as instâncias testadas não possuem suporte para protocolos especializados para HPC, como *Infiniband* por exemplo. Duas métricas foram utilizadas para avaliar o desempenho das aplicações: (i) tempo de execução; e (ii) milhões de operações por segundo executadas pela aplicação (MOPS).

### 4.2. Análise dos Resultados

A Figura 2 apresenta os resultados obtidos, com foco na análise comparativa de desempenho das aplicações do NAS quando executadas na AWS com e sem contêineres. O intuito destes experimentos foi de avaliar se há de fato um sobrecusto no uso de contêineres Singularity com a abordagem de híbrida do MPI em comparação com a execução padrão nas máquinas virtuais. O número de processos utilizados variou entre 1 e 16, uma vez que o *cluster* conta com 16 vCPUs no total. Os valores das métricas analisadas foram obtidos através de uma média de 3 execuções de cada experimento, as quais foram feitas no mesmo dia e em sequência. Todas as médias possuem desvios inferiores a 0.3.

De uma forma geral, não foram observadas diferenças significativas nas métricas avaliadas quando as aplicações foram executadas com ou sem o uso de contêineres. Portanto, conclui-se, ainda que preliminarmente, que sobrecusto do uso de contêineres Singularity e da abordagem híbrida de execução do MPI é desprezível. Como esperado, a aplicação EP apresentou boa escalabilidade por ser uma aplicação embaraçosamente paralela. Por outro lado, as aplicações IS e FT apresentaram problemas de escalabilidade quando executadas com 2 e 4 instâncias (8 e 16 processos MPI, respectivamente). Nesses casos, a comunicação entre processos MPI é feita através da rede TCP/IP e a largura de

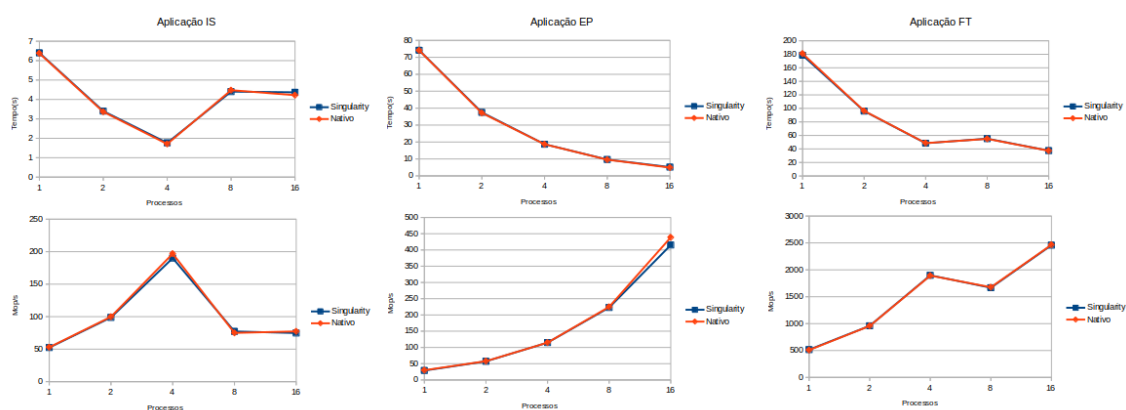


Figura 2. Resultados obtidos com as aplicações IS, EP e FT do NAS.

banda para comunicação nessas instâncias é bastante limitada (classificada como “moderada” na AWS).

## 5. Conclusão

O artigo apresentou um estudo comparativo do desempenho de 3 aplicações do NAS quando executadas na AWS com e sem o uso de contêineres. Os resultados mostraram que o desempenho permanece bem próximo do ambiente nativo da nuvem, mostrando que a virtualização em nível de sistema operacional provida pelo Singularity não gera sobrecarga de desempenho. Como trabalhos futuros, pretende-se realizar testes de desempenho com outras aplicações paralelas, com instâncias da AWS específicas para HPC e com outras ferramentas para contêinerização, como Sarus<sup>4</sup>.

## Referências

- Bailey, D. H., Barszcz, E., Barton, J. T., Browning, D. S., Carter, R. L., Dagum, L., Fatoohi, R. A., Frederickson, P. O., Lasinski, T. A., Schreiber, R. S., et al. (1991). The nas parallel benchmarks. *The International Journal of Supercomputing Applications*, 5(3):63–73.
- Mell, P. and Grance, T. (2011). The nist definition of cloud computing, gaithersburg, md, national institute of standards and technology, 2011. *NIST Special Publication*, pages 800–145.
- Munhoz, V. and Castro, M. (2022). HPC@Cloud: A provider-agnostic software framework for enabling hpc in public cloud platforms. In *Anais do XXIII Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho (WSCAD)*, pages 157–168. SBC.
- Netto, M. A., Calheiros, R. N., Rodrigues, E. R., Cunha, R. L., and Buyya, R. (2018). Hpc cloud for scientific and business applications: taxonomy, vision, and research challenges. *ACM Computing Surveys (CSUR)*, 51(1):1–29.
- Saini, R. and Sainis, N. (2021). Enable high performance computing in cloud: A review. *International Journal of Scientific Research*, 10:44–45.
- Veiga, V. S., Simon, M., Azab, A., Fernandez, C., Muscianisi, G., Fiameni, G., and Marocchi, S. (2019). Evaluation and benchmarking of singularity mpi containers on eu research e-infrastructure. In *IEEE/ACM International Workshop on Containers and New Orchestration Paradigms for Isolated Environments in HPC (CANOPIE-HPC)*, pages 1–10. IEEE.

<sup>4</sup><https://user.cscs.ch/tools/containers/sarus/>