



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

TRABAJO FIN DE GRADO
INGENIERÍA INFORMÁTICA

Dockerización de Aplicación Paralela y Distribuida para Clasificación de EEGs: Análisis de Viabilidad y Rendimiento

DockEEG

Autor

Fernando Cuesta Bueno

Director

Juan José Escobar Pérez



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍAS INFORMÁTICA Y DE
TELECOMUNICACIÓN

Granada, septiembre de 2025



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

DockEEG

Dockerización de Aplicación Paralela y Distribuida para
Clasificación de EEGs: Análisis de Viabilidad y Rendimiento

Autor

Fernando Cuesta Bueno

Director

Juan José Escobar Pérez

DockEEG - Dockerización de Aplicación Paralela y Distribuida para Clasificación de EEGs: Análisis de Viabilidad y Rendimiento

Fernando Cuesta Bueno

Palabras clave: palabra_clave1, palabra_clave2, palabra_clave3,

Resumen

Poner aquí el resumen.

DockEEG - Dockerization of a Parallel and Distributed Application for EEG Classification: Feasibility and Performance Analysis

Fernando Cuesta Bueno

Keywords: Keyword1, Keyword2, Keyword3,

Abstract

Write here the abstract in English.

Yo, **Fernando Cuesta Bueno**, alumno de la titulación Graduado en Ingeniería Informática de la **Escuela Técnica Superior de Ingenierías Informática y de Telecomunicación de la Universidad de Granada**, con DNI 77150866B, autorizo la ubicación de la siguiente copia de mi Trabajo Fin de Grado en la biblioteca del centro para que pueda ser consultada por las personas que lo deseen.

Fdo: Fernando Cuesta Bueno

Granada a 5 de septiembre de 2025.

D. **Juan José Escobar Pérez**, Profesor del Área de XXXX del Departamento de Lenguajes y Sistemas Informáticos de la Universidad de Granada.

Informa:

Que el presente trabajo, titulado *Dockerización de Aplicación Paralela y Distribuida para Clasificación de EEGs: Análisis de Viabilidad y Rendimiento*, *DockEEG*, ha sido realizado bajo su supervisión por **Fernando Cuesta Bueno**, y autorizo la defensa de dicho trabajo ante el tribunal que corresponda.

Y para que conste, expiden y firman el presente informe en Granada a 5 de septiembre de 2025.

El director:

Juan José Escobar Pérez

Agradecimientos

Poner aquí agradecimientos...

Índice general

Acrónimos	1
1. Introducción	3
1.1. Motivación	3
1.2. Objetivos	3
1.2.1. Objetivos específicos	3
2. Gestión del Proyecto	5
2.1. Tareas	5
2.2. Planificación temporal	9
2.3. Estimación de costes	10
3. Estado del arte	13
3.1. Computación de alto rendimiento (HPC)	13
3.1.1. Virtualización vs contenerización	14
3.1.2. Ecosistema de contenedores en HPC	17
3.2. Portabilidad y reproducibilidad científica	21
3.2.1. Cómo los contenedores facilitan la portabilidad de aplicaciones HPC	22
3.2.2. Reproducibilidad de experimentos científicos usando contenedores	23
4. Propuesta principal	25
4.1. Introducción de la propuesta	25
4.2. Aplicación seleccionada: HPMoon	25
4.2.1. Origen y contexto	25
4.2.2. Objetivo de HPMoon	25
4.2.3. Arquitectura y funcionamiento	26
4.2.4. Justificación de la elección para este TFG	27
4.2.5. Configuración y parámetros de compilación y ejecución	28
4.2.6. Selección de parámetros de estudio	31
4.2.7. Diseño de los experimentos	33
4.3. Herramientas y scripts utilizados	36
4.3.1. Compilación del programa	36

4.3.2. Experimentos específicos	36
4.3.3. Experimentos de escalabilidad mononodo	36
4.3.4. Experimentos de escalabilidad multinodo	37
4.3.5. Barrido de hebras	37
4.3.6. Ejecución automatizada	38
4.4. Repositorio del proyecto	38
5. Experimentación	39
5.1. Resultados de los Experimentos	39
5.1.1. Experimentación inicial	39
5.1.2. Pruebas Mononodo	39
5.1.3. Pruebas Multinodo	40
5.1.4. Barrido de Hebras	40
6. Conclusiones y trabajo futuro	43
6.1. Contribuciones	43
6.2. Retos y trabajo futuro	43
7. Bibliografía	45
Bibliografía	48

Índice de figuras

2.1. Diagrama de Gantt del proyecto	9
---	---

Índice de tablas

2.1. Planificación temporal de tareas y horas estimadas	9
2.2. Costes estimados de hardware para el proyecto	11
2.3. Costes estimados de recursos humanos para el proyecto . . .	11
2.4. Coste total estimado del proyecto	11
3.1. Comparativa entre máquinas virtuales y contenedores en entornos HPC, incluyendo resultados de Sharma et al. (2016) [1].	17
4.1. Rango de valores de los parámetros de entrada y su uso desde la línea de argumentos (si está disponible).	30

Acrónimos

PLC	Programmable Logic Controller
HPC	High-Performance Computing
EEG	Electroencephalogram
BCI	Brain-Computer Interface
MOFS	Multi-Objective Feature Selection
MPI	Message Passing Interface
OpenMP	Open Multi-Processing
OpenCL	Open Computing Language
MOGA	Multi-Objective Genetic Algorithm
NSGA-II	Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II
WCSS	Within-Cluster Sum of Squares
BCSS	Between-Cluster Sum of Squares

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

1.2. Objetivos

Analizar la viabilidad y las limitaciones del uso de contenedores, concretamente Docker, para encapsular y ejecutar aplicaciones de alto rendimiento (HPC) en arquitecturas heterogéneas modernas —como big.LITTLE— y entornos multiplataforma, con el fin de facilitar su portabilidad, uso y adopción por parte de la comunidad científica.

1.2.1. Objetivos específicos

- **OB1.** Investigar el estado del arte en el ámbito de la tecnología de contenedores y su aplicación en entornos de computación de alto rendimiento.
- **OB2.** Diseñar e implementar un conjunto de experimentos para evaluar el rendimiento de aplicaciones HPC contenerizadas en diferentes arquitecturas y plataformas.
- **OB3.** Comparar el rendimiento de las aplicaciones contenerizadas con su ejecución nativa en diferentes entornos y arquitecturas, identificando las ventajas y desventajas de cada enfoque.
- **OB4.** Analizar los resultados obtenidos en los experimentos para identificar las limitaciones y desafíos asociados al uso de contenedores en entornos HPC, así como establecer futuras líneas de investigación.

Capítulo 2

Gestión del Proyecto

2.1. Tareas

Tareas de planificación del proyecto

- **Definición de objetivos y alcance del proyecto**
Establecer claramente los objetivos principales y específicos del proyecto, así como el alcance y las limitaciones.
- **Planificación temporal**
Desarrollar un cronograma detallado que incluya todas las fases del proyecto, desde la investigación inicial hasta la redacción final del informe.
- **Asignación de recursos**
Identificar y asignar los recursos necesarios, tanto humanos como materiales, para llevar a cabo el proyecto de manera eficiente.
- **Gestión de riesgos**
Identificar posibles riesgos que puedan afectar al desarrollo del proyecto y establecer planes de contingencia para mitigarlos.
- **Comunicación y seguimiento**
Establecer canales de comunicación efectivos entre todos los miembros del equipo y realizar un seguimiento regular del progreso del proyecto para asegurar que se cumplen los plazos establecidos.

Tareas del OB1 (Estudio del estado del arte)

- **Revisión del estado del arte en HPC**
Estudiar la evolución histórica y tendencias actuales en la computación de alto rendimiento.

- **Análisis del uso de contenedores en HPC**

Revisar tecnologías de contenedores aplicadas a entornos científicos y de alto rendimiento. Comparar contenedores frente a máquinas virtuales en cuanto a eficiencia, overhead y portabilidad en HPC.

- **Estudio del uso de GPU en aplicaciones HPC**

Revisar el papel de las GPUs en la aceleración de aplicaciones científicas y de ingeniería. Identificar librerías y frameworks para programación en GPU. Analizar casos de éxito en la integración de GPU en entornos HPC.

- **Investigación sobre el soporte de GPU en contenedores**

Revisar soluciones actuales para ejecutar GPUs dentro de contenedores. Analizar el grado de compatibilidad con diferentes sistemas operativos y arquitecturas. Estudiar el impacto en rendimiento del uso de GPUs en entornos contenerizados en comparación con la ejecución nativa.

Tareas del OB2 (Diseño e implementación de la propuesta)

- **Selección de la aplicación o problema HPC a estudiar**

Se seleccionará una aplicación representativa del ámbito HPC, justificando su elección en función de su relevancia científica, disponibilidad de código abierto y viabilidad técnica para su ejecución en diferentes plataformas y entornos contenerizados.

- **Preparar entornos y dependencias**

Se identificarán y documentarán las librerías y herramientas necesarias, incluyendo MPI, OpenMP y CUDA. Se garantizará la homogeneidad de las configuraciones en todos los sistemas de prueba y se detallarán los requisitos específicos para cada plataforma (Linux, Windows, macOS).

- **Diseñar y construir imágenes de contenedor**

Se desarrollarán Dockerfiles reproducibles que incluyan todas las dependencias necesarias, asegurando soporte para GPU mediante NVIDIA Container Toolkit. Las imágenes serán versionadas y almacenadas en un registro para facilitar su reutilización y trazabilidad.

- **Definir casos de prueba y parámetros de ejecución**

Se establecerán experimentos mononodo variando el número de hebras, experimentos multinodo con diferentes cantidades de nodos y casos combinados que exploren el espacio de parámetros hebras \times nodos.

- **Automatización y orquestación**

Se implementarán scripts en para automatizar la ejecución de lotes de pruebas, así como la recogida y almacenamiento de logs y resultados.

- **Instrumentación y métricas**

Se instrumentará la aplicación para medir tiempos totales de ejecución, uso de CPU y otros recursos. Se calcularán métricas como aceleración, eficiencia, throughput y overhead comparando la ejecución en contenedor frente a la nativa. Se generarán gráficos comparativos para el análisis de resultados.

- **Reproducibilidad y trazabilidad**

Se mantendrá un repositorio con los Dockerfiles, scripts y documentación del proyecto. Se etiquetarán las versiones de las imágenes y dependencias para asegurar la reproducibilidad de los experimentos.

Tareas del OB3 (Evaluación de rendimiento)

- **Definición de criterios de comparación**

Se establecerán las métricas principales para la comparación de rendimiento y se garantizará la paridad de configuraciones (versiones de compiladores, librerías, drivers).

- **Ejecución de pruebas comparativas**

Se ejecutarán las mismas baterías de experimentos tanto en modo nativo como en contenedor. Se registrarán logs completos de cada ejecución.

- **Recopilación y organización de resultados**

Se guardarán los tiempos de ejecución y métricas de uso de recursos, clasificando los datos según plataforma (Linux, Windows, macOS) y tipo de acelerador (CPU, GPU). Se establecerá un formato homogéneo para los ficheros de resultados (CSV o base de datos).

- **Visualización de resultados comparativos**

Se generarán gráficos y tablas que destaquen los casos extremos (mejores y peores comportamientos), facilitando la interpretación de los resultados.

Tareas del OB4 (Análisis de resultados)

- **Revisión sistemática de los resultados experimentales**

Se analizarán de manera estructurada los datos obtenidos en las pruebas, comparando el rendimiento entre ejecución nativa y contenerizada en las distintas plataformas (Linux, Windows, macOS) y ante el uso o

no de aceleradores (CPU, GPU). Se identificarán tendencias generales, anomalías y comportamientos consistentes.

- **Análisis cuantitativo del rendimiento**

Se calcularán diferencias absolutas y relativas entre ejecución nativa y contenerizada, estimando overheads medios y por caso. Se evaluará la escalabilidad en cada escenario y se aplicará análisis estadístico para validar la significancia de las diferencias observadas.

- **Análisis cualitativo**

Se identificarán ventajas no estrictamente de rendimiento, como portabilidad, reproducibilidad y facilidad de despliegue, así como limitaciones observadas relacionadas con drivers de GPU, gestión de red en contenedores y problemas de compatibilidad.

- **Detección de desafíos en la adopción de contenedores en HPC**

Se evaluará la complejidad asociada a la configuración, despliegue y mantenimiento de entornos contenerizados en HPC, incluyendo la integración de aceleradores como GPU y la gestión de dependencias específicas.

- **Propuesta de líneas de investigación futura**

A partir de los resultados y desafíos identificados, se propondrán posibles líneas de trabajo futuro.

Tareas de redacción del informe final

- **Estructuración del informe**

Se definirá un esquema claro y lógico para el informe, asegurando que cada sección fluya de manera coherente hacia la siguiente.

- **Redacción de secciones técnicas**

Se describirán detalladamente los métodos, experimentos y resultados obtenidos, utilizando un lenguaje técnico preciso y adecuado para la audiencia objetivo.

- **Incorporación de gráficos y tablas**

Se incluirán visualizaciones que apoyen y clarifiquen los puntos clave del informe, asegurando que estén correctamente etiquetadas y referenciadas en el texto.

- **Revisión y edición**

Se realizará una revisión exhaustiva del informe para corregir errores gramaticales, mejorar la claridad y coherencia del texto, y asegurar que todas las referencias bibliográficas estén correctamente citadas.

- **Formato y presentación**
Se aplicarán las normas de formato establecidas por la institución o publicación a la que se destina el informe, asegurando una presentación profesional y uniforme.

2.2. Planificación temporal

En la tabla 2.1 se presenta una estimación del tiempo necesario para completar cada una de las tareas principales del proyecto, desglosado en horas dedicadas por el desarrollador y el tutor.

Tarea	Desarrollador (h)	Tutor (h)
Planificación	20	5
Estado del arte	40	10
Implementación	85	8
Evaluación	55	7
Análisis	30	5
Informe	30	15
Total	260	50

Tabla 2.1: Planificación temporal de tareas y horas estimadas

En la imagen 2.1 se muestra un diagrama de Gantt que ilustra la distribución temporal de las tareas a lo largo del proyecto.

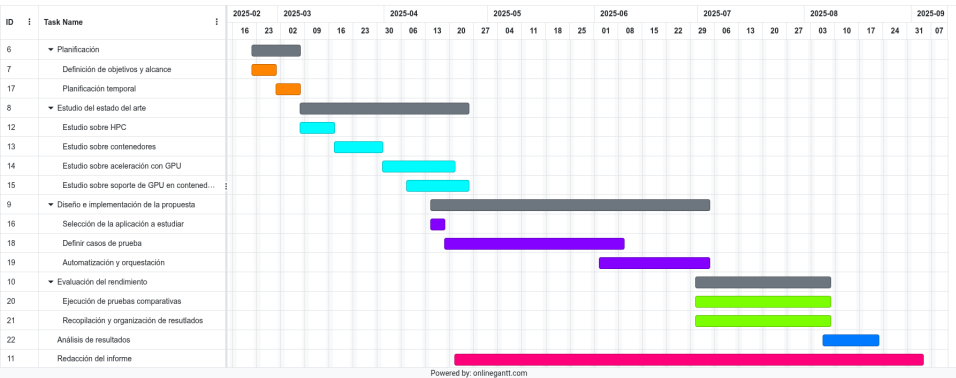


Figura 2.1: Diagrama de Gantt del proyecto

2.3. Estimación de costes

A continuación, se detallan los recursos necesarios para llevar a cabo el proyecto, incluyendo hardware, software y recursos humanos, junto con una estimación de los costes asociados.

Hardware

- Ordenador portátil LG Gram 14Z90Q-G.AA75B, este equipo se utilizará para el desarrollo general del trabajo: creación del código para las pruebas, gestión de las pruebas en el clustery creación de la memoria. Cuenta con un procesador Intel Core i7-1260P, 16 GB de RAM y 512 GB de almacenamiento SSD.
- Ordenador portátil Lenovo Legion 5, utilizado como plataforma principal para la ejecución de pruebas de rendimiento, especialmente aquellas que requieren aceleración por GPU. Este equipo está equipado con un procesador AMD Ryzen 7 4800H (8 núcleos y 16 hilos), 16 GB de memoria RAM DDR4, 512 GB de almacenamiento SSD NVMe y una tarjeta gráfica dedicada NVIDIA GeForce RTX 2060 con 6 GB de VRAM GDDR6. La presencia de la GPU NVIDIA permite la ejecución y evaluación de aplicaciones HPC que hacen uso de CUDA, así como la integración y validación del soporte de GPU en entornos contenerizados mediante NVIDIA Container Toolkit. Además, este equipo facilita la comparación de resultados entre ejecución nativa y contenerizada en escenarios reales de computación de alto rendimiento.
- Ordenador Apple Mac Mini M4, utilizado como plataforma de pruebas para la ejecución y validación de aplicaciones HPC en entornos macOS y arquitectura ARM. Este equipo incorpora un procesador Apple M4 con arquitectura ARM64, núcleos de alto rendimiento y eficiencia, GPU integrada de última generación y 16 GB de memoria unificada. El Mac Mini M4 permitirá evaluar la compatibilidad y el rendimiento de contenedores en sistemas Apple Silicon.

Software

- Sistema operativo Ubuntu 24.04 LTS. Será la distribución Linux principal con la que vamos a trabajar, tanto en forma nativa, como en los contenedores.
- Sistema operativo Microsoft Windows 11 Home. Será la distribución con la que se ejecutarán las pruebas de compatibilidad y rendimiento en entornos Windows.

- Sistema operativo macOS Sequoia 15.5. Será la distribución con la que se ejecutarán las pruebas de compatibilidad y rendimiento en entornos Apple.

Recursos humanos.

Dispositivo	Descripción	Coste (€)
LG Gram 14Z90Q-G.AA75B	Portátil principal de desarrollo	1 200
Lenovo Legion 5	Portátil de pruebas	1 000
Apple Mac Mini M4	Dispositivo de pruebas Apple	599
Total		2 799

Tabla 2.2: Costes estimados de hardware para el proyecto

En cuanto al software, los sistemas operativos Microsoft Windows 11 Home y macOS Sequoia 15.5 vienen incluidos en los dispositivos correspondientes, por lo que no se ha considerado un coste adicional. El sistema operativo Ubuntu 24.04 LTS es de código abierto y gratuito, por lo que tampoco se ha considerado un coste adicional.

Recursos humanos

En la tabla 2.3 se detalla el coste por hora, las horas estimadas y el coste total de los recursos humanos necesarios para llevar a cabo el proyecto.

Recurso	Puesto	€/h	Horas	Total (€)
Fernando Cuesta Bueno	Desarrollador	20	260	5 200
Juan José Escobar Pérez	Tutor/Supervisor	50	50	2 500
Total				7 700

Tabla 2.3: Costes estimados de recursos humanos para el proyecto

Coste total del proyecto

El coste total del proyecto se calcula sumando los costes de hardware, software y recursos humanos. En la tabla 2.4 se detalla el coste total estimado.

Concepto	Coste (€)
Hardware	2 799
Software	0
Recursos humanos	7 700
Total	10 499

Tabla 2.4: Coste total estimado del proyecto

Capítulo 3

Estado del arte

3.1. Computación de alto rendimiento (HPC)

La computación de alto rendimiento (HPC, por sus siglas en inglés) se refiere a la práctica de agregar poder de cómputo para lograr un rendimiento mucho mayor que el que se podría obtener con una computadora convencional, con el objetivo de resolver problemas complejos en ciencias, ingeniería o negocios [2].

Objetivos principales de HPC

El propósito fundamental de HPC es acelerar la resolución de problemas complejos, alcanzando resultados en tiempos factibles que de otra manera requerirían semanas o meses. Para ello, HPC se apoya en dos conceptos centrales: **paralelización** y **escalabilidad**.

Paralelización La paralelización consiste en descomponer un problema en múltiples tareas que puedan ejecutarse simultáneamente en distintos núcleos de procesamiento, ya sean CPUs o GPUs. Este enfoque permite aprovechar todos los recursos del sistema para reducir significativamente el tiempo de ejecución de las aplicaciones. Existen distintos niveles de paralelización:

- **Paralelización a nivel de instrucción:** el procesador ejecuta varias instrucciones de manera simultánea mediante pipelines y unidades vectoriales.
- **Paralelización a nivel de hilo o thread:** diferentes hilos de ejecución procesan tareas concurrentes dentro de un mismo núcleo o CPU.

- **Paralelización a nivel de proceso o nodo:** tareas completas se distribuyen entre múltiples nodos de un clúster, cada uno con su propio conjunto de recursos.

Escalabilidad La escalabilidad se refiere a la capacidad de un sistema HPC para aumentar su rendimiento al añadir más recursos de cómputo. Se distingue entre:

- **Escalabilidad fuerte:** mejora del tiempo de ejecución de un mismo problema al incrementar el número de recursos.
- **Escalabilidad débil:** capacidad de resolver problemas de mayor tamaño proporcionalmente al incremento de recursos.

Lograr buena escalabilidad es crítico, especialmente en clústeres multinodo, donde la comunicación entre nodos y la sincronización de tareas pueden generar cuellos de botella.

Arquitecturas comunes en HPC

Los sistemas HPC modernos pueden clasificarse en función de su arquitectura:

- **Sistemas homogéneos:** utilizan múltiples CPUs idénticas interconectadas, lo que simplifica la planificación de tareas pero puede limitar la eficiencia energética.
- **Sistemas heterogéneos:** combinan distintos tipos de núcleos de procesamiento o aceleradores especializados, como GPUs dedicadas, FPGAs o núcleos de eficiencia energética tipo *big.LITTLE*. Estas arquitecturas permiten mejorar el rendimiento por watt y aprovechar al máximo los recursos disponibles, aunque requieren técnicas avanzadas de programación y planificación de tareas.
- **Clústeres y supercomputadores:** integran múltiples nodos interconectados mediante redes de alta velocidad (Infiniband, Omni-Path), soportando aplicaciones distribuidas que requieren comunicación intensiva entre nodos.

3.1.1. Virtualización vs contenerización

La virtualización y la contenerización representan dos enfoques distintos para la abstracción y gestión de recursos computacionales, cuyo propósito

es ejecutar aplicaciones de manera aislada del sistema operativo anfitrión. Ambas tecnologías han sido ampliamente utilizadas en entornos de servidores y, más recientemente, en la computación de alto rendimiento (HPC), aunque presentan diferencias fundamentales que influyen en el rendimiento, la eficiencia y la portabilidad.

Máquinas virtuales (VMs)

Las máquinas virtuales permiten la ejecución de sistemas operativos completos sobre un hipervisor, el cual actúa como intermediario entre el hardware físico y el sistema operativo invitado. Cada VM incorpora su propio kernel, librerías y aplicaciones, proporcionando un aislamiento fuerte respecto al host y a otras VMs.

Entre las ventajas más destacadas se encuentran:

- **Aislamiento robusto:** garantiza una separación completa de procesos y aplicaciones, reduciendo riesgos de interferencia.
- **Compatibilidad multiplataforma:** posibilita ejecutar sistemas operativos diferentes al del host.
- **Seguridad:** el aislamiento a nivel de kernel refuerza la protección frente a vulnerabilidades.

Sin embargo, en entornos HPC las VMs presentan ciertas limitaciones:

- **Sobrecarga de recursos:** cada VM requiere un kernel completo y librerías redundantes, incrementando el consumo de memoria y almacenamiento.
- **Overhead de rendimiento:** la capa de virtualización introduce latencias que afectan especialmente a cargas intensivas en cómputo y al acceso a hardware especializado como GPUs.
- **Gestión compleja:** operaciones como la migración, el clonado o la actualización son más costosas en comparación con los contenedores.

Contenedores

Los contenedores constituyen una forma de virtualización a nivel de sistema operativo. Comparten el kernel del host, pero mantienen un entorno aislado con librerías y dependencias específicas para cada aplicación. Este enfoque reduce significativamente la sobrecarga respecto a las VMs, permitiendo una mayor eficiencia en la ejecución de aplicaciones HPC.

Sus principales ventajas son:

- **Ligereza y eficiencia:** requieren menos recursos al no replicar un sistema operativo completo, lo que disminuye el overhead en tiempo de ejecución.
- **Portabilidad:** las imágenes de contenedores pueden ejecutarse en distintos sistemas operativos y arquitecturas, facilitando la distribución en entornos heterogéneos.
- **Rapidez de despliegue:** iniciar o actualizar contenedores es mucho más ágil que en las VMs.
- **Compatibilidad con bibliotecas y frameworks HPC:** herramientas como Docker, Singularity/Apptainer o Podman permiten empaquetar dependencias científicas y garantizar la reproducibilidad de los experimentos.

Comparativa entre máquinas virtuales y contenedores en HPC

Diversos estudios han comparado en detalle las diferencias entre la virtualización a nivel de hardware y la virtualización a nivel de sistema operativo. Sharma et al. (2016) [1] concluyen que los contenedores ofrecen un rendimiento cercano al nativo, con una sobrecarga mínima en cargas de CPU y red (menor al 3 %), mientras que las VMs introducen una latencia mayor en operaciones intensivas de memoria (hasta un 10 %) y presentan un rendimiento significativamente inferior en operaciones de E/S de disco (hasta un 80 % peor que contenedores). En cuanto al aislamiento de recursos, las VMs proporcionan mayor robustez en escenarios de multi-tenencia, especialmente frente a cargas adversarias en CPU y memoria, mientras que los contenedores son más susceptibles a interferencias en estos casos, como se resume en la Tabla 3.1.

Desde el punto de vista de la gestión, los contenedores ofrecen despliegues más rápidos (menos de un segundo frente a decenas de segundos en VMs) y una mayor flexibilidad en la asignación de recursos. Sin embargo, la migración en vivo está más desarrollada en VMs, mientras que en contenedores se encuentra en una etapa menos madura. Asimismo, el desarrollo de software se ve favorecido en los contenedores gracias a la construcción más rápida de imágenes, menor tamaño de almacenamiento y capacidades integradas de control de versiones (Sharma et al., 2016) [1].

En entornos HPC, la contenerización se ha consolidado como la opción preferida para aplicaciones que requieren eficiencia, portabilidad y reproducibilidad.

Característica	Máquinas virtuales	Contenedores
Aislamiento	Completo	Parcial (kernel compartido)
Consumo de recursos	Alto	Bajo
Tiempo de arranque	Largo	Corto
Portabilidad	Alta	Muy alta
Acceso a hardware especializado	Limitado	Directo con soporte adecuado
Mantenimiento y despliegue	Complejo	Simple
Rendimiento en CPU	Casi nativo	Casi nativo
Rendimiento en memoria	Degradación $\sim 10\%$	Mejor que VMs
Rendimiento en E/S de disco	Hasta 80 % peor	Cercano a nativo

Tabla 3.1: Comparativa entre máquinas virtuales y contenedores en entornos HPC, incluyendo resultados de Sharma et al. (2016) [1].

3.1.2. Ecosistema de contenedores en HPC

El ecosistema de contenedores en HPC ha experimentado una evolución acelerada en los últimos años, motivado por la necesidad de incrementar la portabilidad, reproducibilidad y facilidad de despliegue de aplicaciones científicas y de ingeniería. Han surgido múltiples tecnologías y frameworks que ofrecen soluciones adaptadas, en mayor o menor medida, a los entornos HPC. Cada uno presenta ventajas, limitaciones y un grado diferente de adopción dentro de la comunidad científica.

Docker

Docker es la plataforma de contenedores más extendida a nivel global. Su éxito radica en la posibilidad de empaquetar aplicaciones con todas sus dependencias en imágenes portables, ejecutables en diferentes sistemas operativos y arquitecturas. Entre sus ventajas destacan:

- Virtualización ligera y eficiente a nivel de sistema operativo, permitiendo la ejecución rápida de contenedores sin la sobrecarga de máquinas virtuales tradicionales.
- Reducción de costos y tiempos de despliegue, al facilitar la creación y reproducción de entornos de software sin necesidad de configuraciones complejas.
- Simplificación del despliegue y gestión de aplicaciones, al separar software de la infraestructura y permitir que una imagen esté lista para ejecutar en segundos.

- Bajo consumo de recursos y alto rendimiento, compartiendo kernel y bibliotecas del host, con imágenes más pequeñas y arranque mucho más rápido que máquinas virtuales.
- Portabilidad extrema, permitiendo mover aplicaciones entre diferentes máquinas Linux de manera consistente.
- Aislamiento y seguridad, garantizando que contenedores independientes no interfieran entre sí, y sin dejar archivos residuales tras su eliminación.
- Código abierto y gratuito, eliminando la necesidad de licencias comerciales.
- Escalabilidad y usabilidad simplificada gracias a la arquitectura de microservicios y soporte para herramientas de orquestación como Kubernetes [3].

No obstante, en entornos HPC su uso está limitado por la necesidad de permisos de root para ejecutar contenedores y las restricciones de seguridad en clústeres multiusuario.

Podman

Podman surge como alternativa a Docker y ofrece compatibilidad casi total con sus comandos y formatos de imagen, con un aspecto clave: no requiere privilegios de root para la ejecución de contenedores. Esto lo convierte en una herramienta especialmente atractiva para entornos HPC multiusuario y con fuertes restricciones de seguridad.

Entre sus características más destacadas se incluyen:

- **Modo rootless:** permite ejecutar y construir contenedores sin privilegios administrativos, aislando el entorno del usuario y reduciendo riesgos de escalada de privilegios.
- **Compatibilidad con OCI y múltiple runtime:** soporta los runtimes `runc` y `crun`, así como la creación de imágenes compatibles con OCI.
- **Modelo fork-exec sin daemon:** se aproxima a la filosofía HPC al no depender de un demonio central, facilitando la auditoría y el control de recursos.
- **Rendimiento a escala comparable a bare-metal:** en pruebas con aplicaciones reales (LS-DYNA y benchmarks estándar de CPU y memoria), Podman mostró overhead muy bajo (2.1 %), comparable al

de Singularity [4]. Con ajustes adicionales y scripting, Podman puede igualar o incluso superar el rendimiento de ejecuciones bare-metal y del runtime Shifter en NERSC [5].

- **Soporte para Pods:** permite agrupar contenedores compartiendo namespaces, facilitando la ejecución de aplicaciones complejas en paralelo.
- **Optimización en HPC a gran escala:** mediante el uso del modo *exec* para MPI, Podman comparte recursos en un mismo contenedor, minimizando overhead de arranque y mejorando el rendimiento en aplicaciones intensivas en metadatos [5].
- **Integración con GPU y sistemas HPC avanzados:** soporta hooks OCI y wrappers para configurar librerías, variables de entorno y acceso a interconexiones de alta velocidad, como Cray Slingshot, garantizando rendimiento en entornos heterogéneos [5].
- **Gestión de usuarios y almacenamiento:** permite subuid/subgid persistentes y proporciona almacenamiento NVMe local en nodos de login para mejorar tiempos de construcción de imágenes y productividad del usuario [5].

Gracias a estas capacidades, Podman se posiciona como una alternativa robusta y escalable para la contenerización en HPC. Su modo rootless, rendimiento competitivo y soporte para entornos distribuidos lo convierten en una opción cada vez más valorada en centros de supercomputación y laboratorios de investigación [4, 5].

Comparativa y adopción en la comunidad científica

En función de su adopción y casos de uso, destacan los siguientes puntos:

- **Docker:** ampliamente utilizado en desarrollo y pruebas, gracias a su ecosistema maduro, virtualización ligera, portabilidad y eficiencia en recursos [3].
- **Podman:** cada vez más valorado en HPC, por su ejecución rootless, su rendimiento a escala comparable a bare-metal y su integración con runtimes modernos [4, 5].

Retos principales en la contenerización en HPC

La computación de alto rendimiento presenta una serie de desafíos que impactan tanto en la eficiencia como en la adopción de tecnologías emer-

gentes como la contenerización. Entre los principales retos identificados se encuentran los siguientes [6]:

- **Compatibilidad de software y librerías:** uno de los mayores obstáculos es la incompatibilidad entre librerías del host y del contenedor (por ejemplo, distintas versiones de *glibc* o incompatibilidades en el ABI del kernel), lo que puede provocar fallos o comportamientos inesperados. Asimismo, no todas las imágenes de Docker son directamente portables a otros motores de contenedores utilizados en HPC, debido a la falta de estandarización completa en los hooks de ejecución y la gestión de privilegios.
- **Seguridad:** los contenedores en HPC enfrentan amenazas como la escalada de privilegios, ataques de denegación de servicio (DoS) o fugas de información. Dado que múltiples contenedores comparten el mismo kernel, una vulnerabilidad en uno de ellos puede comprometer la estabilidad del sistema completo. Aunque mecanismos como *cgroups* o los *user namespaces* reducen el riesgo, no lo eliminan por completo, y muchos centros de supercomputación optan por deshabilitar estas características, limitando así el uso de contenedores modernos.
- **Degradación del rendimiento:** la ejecución de aplicaciones en contenedores puede implicar pérdidas de eficiencia, especialmente en el uso de librerías optimizadas para GPUs o interconexiones de alta velocidad (p. ej., InfiniBand). Además, al aumentar el número de procesos MPI en un mismo nodo, los costes de comunicación interna se incrementan, afectando tanto a operaciones punto a punto como colectivas.
- **Limitaciones en la personalización del kernel:** a diferencia de entornos nativos, los contenedores restringen la instalación de módulos de kernel para preservar el aislamiento, lo que impide ajustes específicos de bajo nivel que podrían mejorar el rendimiento en escenarios HPC. Aunque existen propuestas experimentales como *Xcontainer*, estas aún no están maduras para un uso generalizado.

Por otro lado, el uso de contenedores en macOS presenta limitaciones importantes en cuanto al acceso y aprovechamiento de la GPU. A diferencia de los entornos Linux, donde es posible habilitar el acceso directo a dispositivos de hardware desde los contenedores, en macOS existen restricciones derivadas de la arquitectura del sistema y de la infraestructura de virtualización utilizada por Docker. Estas limitaciones afectan especialmente a aplicaciones HPC y de inteligencia artificial que requieren aceleración por GPU, dificultando su ejecución eficiente y restringiendo el rendimiento alcanzable en este sistema operativo.

Ausencia de soporte para GPU passthrough: Docker en macOS no permite el acceso directo a la GPU del host debido a la falta de soporte para GPU passthrough en la infraestructura de virtualización de Apple. Esto impide que los contenedores aprovechen la aceleración por hardware de la GPU, lo que limita el rendimiento de aplicaciones que dependen de procesamiento gráfico intensivo o cómputo acelerado.

Dependencia de la infraestructura de virtualización de Apple: Docker en macOS utiliza el framework de virtualización de Apple, el cual no proporciona acceso directo a la GPU. Esta dependencia restringe la capacidad de los contenedores para ejecutar cargas de trabajo que requieren acceso nativo a la GPU, afectando negativamente el rendimiento y la compatibilidad de aplicaciones científicas y de ingeniería.

Limitaciones en la aceleración de GPU en contenedores: Aunque existen alternativas como Vulkan y MoltenVK que permiten cierto grado de aceleración gráfica en contenedores sobre macOS, el rendimiento obtenido es considerablemente inferior al de soluciones nativas en Linux o Windows. Además, la configuración de estas tecnologías suele ser compleja y no garantiza compatibilidad total con todas las aplicaciones.

Desafíos en la implementación de soluciones de GPU en contenedores: Habilitar el acceso a la GPU en contenedores sobre macOS enfrenta desafíos técnicos significativos, principalmente debido a las restricciones impuestas por la infraestructura de virtualización y la ausencia de soporte oficial para GPU passthrough. Esto limita el desarrollo y la ejecución eficiente de aplicaciones HPC y de inteligencia artificial en entornos contenerizados sobre sistemas Apple.

En conjunto, estos retos evidencian que la contenerización en HPC, si bien aporta ventajas en reproducibilidad, portabilidad y flexibilidad, requiere soluciones específicas para gestionar dependencias, garantizar la seguridad en entornos compartidos y mantener la eficiencia en hardware y comunicaciones paralelas. Muchas de estas cuestiones permanecen abiertas y constituyen áreas activas de investigación.

3.2. Portabilidad y reproducibilidad científica

La portabilidad y la reproducibilidad son aspectos fundamentales en la computación científica moderna. La creciente heterogeneidad de plataformas, que abarca desde supercomputadores tradicionales hasta infraestructuras en la nube o clústeres híbridos CPU-GPU, dificulta que una aplicación pueda ejecutarse sin modificaciones en distintos entornos. Además, la reproducibilidad de resultados experimentales se ha convertido en un reto central, ya que incluso pequeñas diferencias en el entorno de ejecución pueden con-

ducir a variaciones significativas en los resultados obtenidos.

En este contexto, la contenerización emerge como una solución tecnológica que no solo aporta ventajas en términos de gestión e infraestructura, sino que también permite garantizar que las aplicaciones sean fácilmente portables y que los experimentos científicos puedan reproducirse bajo condiciones controladas y consistentes.

3.2.1. Cómo los contenedores facilitan la portabilidad de aplicaciones HPC

La portabilidad en HPC se refiere a la capacidad de ejecutar una misma aplicación en distintos sistemas de cómputo sin necesidad de modificar su código fuente ni su configuración. Los contenedores facilitan esta portabilidad al encapsular la aplicación junto con todas sus dependencias: bibliotecas, compiladores, intérpretes, librerías de comunicación como MPI y entornos de ejecución específicos. Esto reduce la fricción asociada al “código que funciona en un sistema pero falla en otro”.

Los contenedores permiten definir una única imagen que puede ser desplegada en múltiples entornos, siempre que exista soporte para la tecnología de contenedores utilizada. Este enfoque se traduce en:

- **Consistencia entre plataformas:** el mismo contenedor puede ejecutarse en distintos sistemas operativos y arquitecturas, minimizando incompatibilidades.
- **Reducción del tiempo de despliegue:** los usuarios no necesitan adaptar ni recompilar el software para cada infraestructura.
- **Facilitación del acceso a infraestructuras heterogéneas:** especialmente útil en entornos modernos que combinan CPUs y GPUs, donde las dependencias de drivers y librerías suelen ser críticas.
- **Compatibilidad con entornos locales, HPC y nube:** la misma imagen puede ser utilizada en clusters virtuales autoescalables en la nube, infraestructuras HPC tradicionales o equipos personales, asegurando un entorno consistente y reproducible [7].

Además, el uso de gestores de paquetes como Nix dentro de contenedores permite fijar versiones exactas de bibliotecas y dependencias (*pureza funcional*), asegurando que cualquier ejecución posterior del contenedor produzca resultados idénticos, sin importar la plataforma [7].

3.2.2. Reproducibilidad de experimentos científicos usando contenedores

La reproducibilidad científica requiere que los resultados de un experimento puedan replicarse bajo las mismas condiciones. En computación científica, factores como la evolución de bibliotecas, diferencias en compiladores o cambios en sistemas operativos suelen comprometer la reproducibilidad.

Los contenedores abordan estos problemas al capturar no solo el código de la aplicación, sino también el contexto completo de ejecución. Entre los beneficios se incluyen:

- **Versionado del entorno:** mediante tecnologías como Nix dentro de Docker o Singularity, se garantiza que los paquetes y librerías utilizadas en un experimento mantengan versiones fijas, asegurando reproducibilidad extrema incluso años después [7].
- **Transparencia:** al compartir la imagen del contenedor junto con código y datos, otros investigadores pueden verificar que los resultados se obtuvieron en condiciones idénticas.
- **Colaboración eficiente:** equipos distribuidos geográficamente pueden trabajar sobre un entorno común sin necesidad de configurar individualmente cada sistema.
- **Reducción de la carga administrativa:** el uso de plantillas de contenedores (*Container Template Library* - *CTL*) permite a los investigadores modificar construcciones de software según sus necesidades, manteniendo la consistencia y reproducibilidad sin depender de la intervención de administradores de sistemas [7].
- **Escalabilidad y flexibilidad:** la misma metodología de contenerización permite escalar recursos según sea necesario, desde computadoras personales hasta clusters HPC y nubes públicas, asegurando consistencia de entorno y resultados reproducibles [7].

En conjunto, los contenedores, especialmente cuando se integran con gestores de paquetes como Nix y con tecnologías HPC como Singularity, proporcionan un marco sólido para garantizar la reproducibilidad de resultados científicos y habilitar la computación científica en infraestructuras diversas de manera eficiente y segura.

Capítulo 4

Propuesta principal

4.1. Introducción de la propuesta

En esta sección se presenta la propuesta general del trabajo, explicando la metodología seguida para evaluar el uso de contenedores en entornos HPC. Se justifica la elección de los experimentos en función de los objetivos del TFG y del estado del arte, y se define el alcance de los mismos, indicando qué se medirá y evaluará.

4.2. Aplicación seleccionada: HPMoon

4.2.1. Origen y contexto

HPMoon es un software desarrollado en el marco de la tesis doctoral “*Energy-Efficient Parallel and Distributed Multi-Objective Feature Selection on Heterogeneous Architectures*”, defendida por Juan José Escobar Pérez el 20 de febrero de 2020 en la Universidad de Granada. El programa se concibe como una herramienta del proyecto *e-hpMOBE* y está disponible públicamente en un repositorio de GitHub. Su desarrollo fue apoyado por proyectos de investigación nacionales financiados por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (MICIU) y fondos FEDER, así como por una beca de NVIDIA. Esta aplicación se utiliza como caso de estudio en este TFG por su significativa relevancia científica y tecnológica en el ámbito de la computación de alto rendimiento (HPC).

4.2.2. Objetivo de HPMoon

El objetivo principal de HPMoon es abordar la clasificación no supervisada de señales de Electroencefalograma (EEG) en tareas de Interfaz Cerebro-

Computadora (BCI). Este es un problema de alta dimensionalidad y computacionalmente costoso debido a las características de las señales EEG y al gran número de características que pueden contener. La aplicación combina la selección de características multiobjetivo (MOFS) con algoritmos paralelos y energéticamente eficientes, buscando minimizar el tiempo de ejecución y el consumo de energía, cruciales en problemas de *Machine Learning* y bioingeniería que requieren plataformas de alto rendimiento.

4.2.3. Arquitectura y funcionamiento

HPMoon implementa un procedimiento paralelo multinivel y energéticamente eficiente para la selección de características multiobjetivo (MOFS). La versión descrita como la “más eficiente desarrollada hasta la fecha” es ODGA. La arquitectura y funcionamiento se pueden desglosar en:

- **Enfoque Wrapper con Algoritmos Genéticos Multiobjetivo (MOGA):** HPMoon utiliza un enfoque wrapper donde un MOGA, específicamente una adaptación del algoritmo NSGA-II, realiza la selección de características. Este algoritmo opera con poblaciones de individuos (cromosomas) que codifican diferentes selecciones de características.
- **Evaluación de Fitness con K-means:** La fitness de cada individuo se evalúa mediante el algoritmo K-means para clasificación no supervisada. El objetivo es minimizar dos funciones de coste:
 - f_1 (minimización de WCSS), que representa la suma de distancias dentro de los clústeres.
 - f_2 (maximización de BCSS), que se refiere a la suma de distancias entre los centroides.

Estas funciones se normalizan en el intervalo (0,1).

- **Paralelismo Multinivel:** La aplicación explota hasta cuatro niveles de paralelismo en arquitecturas heterogéneas:
 1. Distribución entre nodos del clúster mediante MPI.
 2. Distribución entre dispositivos CPU/GPU por nodo, gestionado con OpenMP.
 3. Distribución entre Unidades de Cómputo (CUs) o hilos de CPU.
 4. Paralelismo de datos en GPU para K-means, aprovechando el paralelismo de datos para cálculo de distancias y actualización de centroides.

- **Tecnologías de implementación:** El código está desarrollado principalmente en C++, utilizando:
 - MPI (*Message Passing Interface*) para la comunicación entre nodos en sistemas distribuidos.
 - OpenMP para el paralelismo en CPU.
 - OpenCL para los kernels de K-means en GPU.
- **Optimización de carga de trabajo:** Incluye esquemas master-worker con balanceo dinámico de carga entre CPU y GPU, así como entre nodos del clúster. Las versiones posteriores, como ODGA, optimizan la comunicación y distribución para minimizar desequilibrio de carga.
- **Configuración y uso:** El programa se ejecuta desde la línea de comandos, permitiendo la configuración de parámetros (número de subpoblaciones, tamaño de la población, migraciones, generaciones, número de características y uso de CPU/GPU) mediante un archivo XML.

4.2.4. Justificación de la elección para este TFG

HPMoon se selecciona como caso de estudio por las siguientes razones, que lo convierten en un candidato ideal para analizar portabilidad, rendimiento y overhead de contenedores:

- **Relevancia en HPC y problemas reales:** HPMoon aborda un problema intensivo en cómputo (clasificación EEG de alta dimensionalidad) frecuente en bioinformática e ingeniería biomédica. Su complejidad permite generar métricas relevantes en HPC.
- **Paralelización multinivel y arquitecturas heterogéneas:** Diseñado para explotar múltiples niveles de paralelismo en CPUs multinúcleo, GPUs y sistemas distribuidos (clústeres), permitiendo análisis exhaustivo en diversas configuraciones.
- **Énfasis en eficiencia energética:** Minimiza consumo de energía y tiempo de ejecución, aspecto crucial en HPC moderna.
- **Estrategias de balanceo de carga:** Distribución dinámica de carga entre CPU y GPU, permitiendo manejar diferencias de capacidad y consumo energético de dispositivos heterogéneos.
- **Disponibilidad y madurez:** Software robusto derivado de tesis doctoral y publicaciones científicas, con versiones evolutivas (SGA, PGA, OPGA, MDGA, MPGA, DGA, DGA-II, ODGA, GAAM) y documentación completa.

- **Modelos de energía-tiempo:** Incluye desarrollo y evaluación de modelos para predecir comportamiento de algoritmos en sistemas mono-computador y distribuidos, proporcionando base sólida para comparar resultados en contenedores.
- **Complejidad y desafíos de optimización:** Presenta retos como balanceo de carga en entornos heterogéneos, irregularidades en accesos a memoria y gestión de comunicación entre nodos y dispositivos, ideales para evaluar impacto de contenedores en optimización del código.

4.2.5. Configuración y parámetros de compilación y ejecución

La aplicación HPMoon requiere una fase previa de compilación y, posteriormente, una configuración en tiempo de ejecución a través de un fichero XML (con soporte parcial mediante parámetros de línea de comandos).

Compilación

La compilación se realiza mediante un *Makefile*, los principales parámetros de compilación son:

- **N_FEATURES (NF):** número de características de la base de datos (columnas). Debe estar entre 4 y el máximo disponible.
- **COMP (COMPILER):** compilador MPI a emplear (por defecto, `mpic++`).

Estos parámetros se procesan en tiempo de compilación para evitar el uso de memoria dinámica y maximizar el rendimiento. El ejecutable resultante, denominado `hpmoon`, se ubica en el directorio `bin`.

Configuración en tiempo de ejecución

La configuración en tiempo de ejecución se realiza principalmente mediante un fichero XML, que permite ajustar tanto los parámetros de los algoritmos evolutivos como la gestión de recursos computacionales. Los parámetros más relevantes son:

- **NSubpopulations:** número total de subpoblaciones (modelo de islas).
- **SubpopulationSize:** tamaño de cada subpoblación (número de individuos).

- **NGlobalMigrations:** número de migraciones entre subpoblaciones en diferentes nodos.
- **NGenerations:** número de generaciones a simular.
- **MaxFeatures:** número máximo de características permitidas.
- **DataFileName:** fichero de salida con la aptitud de los individuos del primer frente de Pareto.
- **PlotFileName:** fichero con el código de gnuplot para visualización.
- **ImageFileName:** fichero de salida con la gráfica generada.
- **TournamentSize:** número de individuos en el torneo de selección.
- **NInstances:** número de instancias (filas) de la base de datos a utilizar.
- **FileName:** nombre del fichero de la base de datos de entrada.
- **Normalize:** indica si la base de datos debe ser normalizada.
- **NDevices:** número de dispositivos OpenCL empleados en el nodo.
- **Names:** lista de nombres de dispositivos OpenCL, separados por comas.
- **ComputeUnits:** unidades de cómputo por dispositivo OpenCL, en el mismo orden que **Names**.
- **WiLocal:** número de *work-items* por unidad de cómputo, alineado con los dispositivos.
- **CpuThreads:** número de hilos de CPU para la evaluación de aptitud. Si es 1 y **NDevices=0**, la ejecución es secuencial.
- **KernelsFileName:** fichero con los kernels de OpenCL.

Muchos de estos parámetros pueden especificarse también mediante opciones en la línea de comandos al ejecutar **hpmoon**, aunque no todos están disponibles de esta forma. Esta circunstancia se refleja en la columna **CMD OPTION** de la Tabla 4.1, donde un guion (-) indica ausencia de soporte por línea de comandos.

PARÁMETRO	RANGO	CMD TION	OP-
N_FEATURES	$4 \leq NF \leq$ Número de características de la base de datos	-	
NSubpopulations	$1 \leq NP$	-ns	
SubpopulationSize	$4 \leq PS$	-ss	
NGlobalMigrations	$1 \leq NM$	-ngm	
NGenerations	$0 \leq NG$	-g	
MaxFeatures	$1 \leq \text{MaxF}$	-maxf	
DataFileName	Nombre de fichero válido	-plotdata	
PlotFileName	Nombre de fichero válido	-plotsrc	
ImageFileName	Nombre de fichero válido	-plotimg	
TournamentSize	$2 \leq TS$	-ts	
NInstances	$4 \leq NI \leq$ Número de instancias de la base de datos	-trni	
FileName	Base de datos de entrenamiento existente	-trdb	
Normalize	1 ó 0	-trnorm	
NDevices	$0 \leq ND$	-	
Names	Nombre de dispositivo existente	-	
ComputeUnits	$1 \leq CU$	-	
WiLocal	$1 \leq WL \leq$ Máx. work-items locales del dispositivo	-	
CpuThreads	$0 \leq CT$	-	
KernelsFileName	Fichero de kernels existente	-ke	
Display usage	-	-h	
List OpenCL devices	-	-l	

Tabla 4.1: Rango de valores de los parámetros de entrada y su uso desde la línea de argumentos (si está disponible).

4.2.6. Selección de parámetros de estudio

La decisión de dejar la mayoría de los parámetros con sus valores por defecto y estudiar únicamente la relación entre el número de subpoblaciones y el número de hebras se basa en la arquitectura de paralelismo multinivel inherente al diseño del programa y su impacto directo en la distribución de la carga de trabajo y el rendimiento. Algunas de las recomendaciones mencionadas provienen de la guía de usuario de la aplicación.

A continuación, se explica en detalle:

1. Diseño del programa con paralelismo multinivel:

- El programa es un algoritmo evolutivo basado en subpoblaciones con paralelismo multinivel.
- Utiliza MPI (Message Passing Interface) para distribuir las subpoblaciones entre los nodos de un clúster.
- Dentro de cada nodo, emplea OpenMP para distribuir dinámicamente las subpoblaciones o individuos entre los dispositivos disponibles (CPU y GPU).
- La evaluación de la aptitud de los individuos se realiza utilizando OpenMP en la CPU y OpenCL en la GPU, ofreciendo hasta tres niveles de paralelismo en la CPU y hasta cuatro en la GPU.

2. Importancia del número de subpoblaciones (NSubpopulations):

- NSubpopulations representa el número total de subpoblaciones, un parámetro fundamental para el modelo basado en islas del algoritmo.
- Se sugiere que aumentar el número de subpoblaciones puede generar resultados de buena calidad, incluso más que aumentar el número de individuos [8].
- Este parámetro es crucial porque define cómo se divide el trabajo a nivel más alto (distribución MPI entre nodos) y cómo estas unidades de trabajo pueden ser gestionadas posteriormente por OpenMP dentro de cada nodo [8].

3. Importancia del número de hebras (CPU y GPU):

- El programa hace un uso intensivo de hilos (*threads*) para la evaluación de la aptitud.
- El parámetro `CpuThreads` especifica el número de hilos de CPU a utilizar en la evaluación de aptitud. La recomendación es que este valor sea igual al número de núcleos lógicos de la CPU para un buen rendimiento.

- Para la GPU, `NDevices` (número de dispositivos OpenCL), `ComputeUnits` (unidades de cómputo, λ) y `WiLocal` (número de elementos de trabajo o hilos por unidad de cómputo) son esenciales. Se aconseja que `WiLocal` sea un múltiplo de 32 o 64 para mejorar el rendimiento de OpenCL, y que la combinación óptima de `WiLocal` y `ComputeUnits` depende de las características del problema y del dispositivo.
- Estos parámetros controlan directamente la paralelización de la función de evaluación en la GPU con OpenCL y la distribución dinámica de individuos entre los dispositivos mediante OpenMP [8].

4. Importancia del número de nodos:

- El programa está diseñado para ejecutarse en sistemas distribuidos, como clústeres, donde múltiples nodos están interconectados [8, 9].
- La versión DGA (Distributed Genetic Algorithm) añade un cuarto nivel de paralelismo al distribuir las subpoblaciones entre los nodos del clúster utilizando MPI. El proceso maestro (MPI 0) se encarga de esta distribución dinámica [8, 9].
- La escalabilidad y el rendimiento del algoritmo se ven directamente afectados por el número de nodos utilizados. Los experimentos demuestran que usar más nodos puede llevar a reducciones significativas en el tiempo de ejecución y el consumo de energía, logrando picos de speedup de hasta 83 veces y reduciendo el consumo energético a un 4.9 % en el mejor de los casos [8, 9].
- La heterogeneidad de los nodos y su configuración de CPU/GPU también influye en la eficiencia de la distribución de carga y el consumo de energía. Por lo tanto, el número de nodos es un parámetro fundamental para el estudio del paralelismo a nivel de sistema distribuido [8, 9].

5. Razones para mantener otros parámetros por defecto:

- **Prioridad del estudio de paralelismo:** La configuración de `NSubpopulations` y de los hilos (`CpuThreads`, `WiLocal`, `ComputeUnits`) son los que más influyen directamente en la estrategia de paralelismo y la asignación de recursos computacionales, que son el objetivo principal de este estudio inicial [8].
- **Parámetros de compilación vs. ejecución:** Parámetros como `N_FEATURES` se establecen en tiempo de compilación (`make`), lo que los hace menos flexibles para pruebas de rendimiento en tiempo de ejecución. Los parámetros de subpoblaciones y hebras, por el contrario, son de tiempo de ejecución (archivo XML).

- **Impacto de la función de evaluación:** La función de evaluación (algoritmo K-means) consume más del 99 % del tiempo de ejecución para tamaños de población moderados [8]. Por lo tanto, el enfoque en cómo se paraleliza esta parte (a través de subpoblaciones y hebras) es crítico para el rendimiento.
- **Otros parámetros secundarios:** Otros parámetros, como `NGlobalMigrations`, `NGenerations`, `MaxFeatures`, `TournamentSize`, `NInstances`, `FileName`, `Normalize`, etc., están más relacionados con la configuración específica del algoritmo evolutivo, la gestión de datos o la calidad de la solución final, pero no afectan tan directamente al comportamiento fundamental del paralelismo y la escalabilidad del sistema [8].
- **Consideraciones de recursos:** El uso de bases de datos muy grandes (`NInstances`, `N_FEATURES`) puede provocar que el programa aborte debido a limitaciones de memoria local en la GPU. Es más prudente estudiar estos factores una vez que se comprenda bien el rendimiento del paralelismo fundamental.

En resumen, al concentrarse en el número de subpoblaciones, el número de hebras y el número de nodos, se aborda directamente la capacidad del programa para aprovechar arquitecturas paralelas y la distribución de la carga de trabajo en todos los niveles, sentando las bases para análisis más detallados posteriormente [8].

4.2.7. Diseño de los experimentos

Los experimentos se estructuran en varias fases con el fin de determinar los parámetros óptimos y evaluar la escalabilidad y portabilidad de HPMoon en distintos entornos y plataformas.

Determinación del número óptimo de subpoblaciones

Se realizarán ejecuciones exploratorias con distintas configuraciones de subpoblaciones y hebras, para definir el parámetro de `NSubpopulations` a usar en los tests posteriores:

- Se lanzarán ejecuciones con 1, 2, 4, 8 y 16 subpoblaciones.
- Para cada configuración de subpoblaciones, se evaluará con 1, 2, 4, 8 y 16 hebras por subpoblación.

Estudio del rendimiento al requerir más hebras de las disponibles

En el dispositivo Lenovo Legion 5, que dispone de un máximo de 16 hebras, se evaluará cómo se comporta la aplicación al requerir un número de hebras mayor al disponible:

- En las ejecuciones multinodo, cada nodo tendrá un número de hebras tal que el número total de hebras requerido sea igual a: *número de nodos \times hebras por nodo*.
- Se realizarán dos variantes de test:
 1. Variante 1: si el número total de hebras requerido supera el máximo del dispositivo (16), el test no se ejecuta.
 2. Variante 2: se ejecutan los tests aunque el número total de hebras requerido sea mayor a 16.
- El objetivo es determinar si es necesario limitar el número de hebras solicitadas en los tests posteriores.

Estudio del rendimiento al utilizar la misma GPU en todos los nodos

En un escenario multinodo local, donde los nodos corresponden a procesos distribuidos dentro de un mismo dispositivo, surge la necesidad de analizar cómo afecta el uso de la GPU al rendimiento de HPMoon. Dado que el dispositivo dispone de una única tarjeta gráfica, se plantean dos configuraciones posibles:

- **Acceso compartido a la GPU:** todos los nodos utilizan la misma tarjeta gráfica del dispositivo. Esta configuración permite evaluar el impacto de la contención del recurso gráfico cuando varios procesos intentan ejecutar cálculos en paralelo sobre la misma GPU.
- **GPU asignada a un único nodo:** únicamente un nodo accede a la GPU, mientras que el resto de nodos realiza los cálculos únicamente con la CPU. Este escenario permite medir si centralizar el uso de la GPU en un único nodo mejora la eficiencia global frente al acceso compartido.

El objetivo de este estudio es determinar cuál de estas dos estrategias proporciona un mejor rendimiento en configuraciones multinodo locales:

- Evaluar la eficiencia de ejecución en términos de tiempo total de cálculo y utilización de recursos.

- Analizar la escalabilidad de la aplicación cuando se incrementa el número de nodos, comparando ambos escenarios.
- Extraer recomendaciones sobre la asignación de la GPU en futuras pruebas multinodo, considerando la relación entre rendimiento y complejidad de gestión de los recursos.

Con ello, se podrá establecer si, en entornos multinodo locales con una única GPU disponible, resulta más eficiente que todos los nodos compartan la tarjeta gráfica o si es preferible que solo uno de ellos la utilice.

Experimentos de escalabilidad

Una vez definido el número óptimo de subpoblaciones, el rango válido de hebras y la estrategia de uso de la GPU en entornos multinodo, se realizarán los siguientes experimentos:

- **Escalabilidad mononodo:** con un único nodo fijo, se escala el número de hebras.
- **Escalabilidad multinodo:** con una única hebra por nodo, se escala el número de nodos.
- **Barrido de hebras:** se ejecutan todas las combinaciones posibles de número de nodos y hebras por nodo.

Plataformas y entornos de ejecución

Los experimentos se realizarán en distintas plataformas y entornos, tanto con uso único de CPU como la combinación con uso de GPU (salvo en el caso de Mac, donde el uso de GPU en contenedores es objeto de estudio):

- Ubuntu 24.04: ejecución nativa, y en contenedores Docker y Podman.
- Windows 11 Home: ejecución en contenedores Docker y Podman.
- MacOS Sequoia 15.5: ejecución en contenedores Docker y Podman.

Esta estructura permitirá evaluar la escalabilidad, portabilidad y rendimiento de HPMoon en entornos containerizados y nativos, así como en arquitecturas heterogéneas con CPU y GPU.

4.3. Herramientas y scripts utilizados

Para llevar a cabo los experimentos propuestos, se han desarrollado diversos scripts que automatizan las pruebas en diferentes plataformas, entornos y configuraciones. Estos scripts permiten evaluar la escalabilidad, portabilidad y rendimiento de HPMoon en arquitecturas heterogéneas y entornos contenerizados. A continuación, se describen los principales scripts y su propósito:

4.3.1. Compilación del programa

- **Carpeta:** `utils`
- **Script:**
 - `build_hpmoon.sh`
- **Descripción:** Compila el programa HPMoon en el directorio de trabajo especificado utilizando `make` con parámetros específicos para maximizar el rendimiento, como el número de características (`N_FEATURES=3600`). Este paso asegura que el ejecutable esté disponible antes de iniciar los experimentos.

4.3.2. Experimentos específicos

- **Carpeta:** `experiments`
- **Script:**
 - `run_ubuntu_native_limit.sh`
 - `run_ubuntu_native_no-limit.sh`
 - `run_ubuntu_native_subpops_threads.sh`
- **Descripción:** Diseñados para pruebas concretas, como el impacto de exceder el número máximo de hebras disponibles o la relación entre subpoblaciones y hebras, permitiendo un análisis más detallado de parámetros clave.

4.3.3. Experimentos de escalabilidad mononodo

- **Carpeta:** `single-node`
- **Script:**
 - `run_ubuntu_native.sh`

- **Descripción:** Ejecuta pruebas de escalabilidad en un único nodo, variando el número de hebras utilizadas, evaluando el rendimiento nativo en sistemas Ubuntu sin contenedores.
- **Variantes:**
 - Versiones para contenedores:
 - `run_ubuntu_container.sh`
 - `run_mac_container.sh`
 - `run_windows_container.ps1`
 - Versiones para GPU:
 - `run_ubuntu_gpu_container.sh`
 - `run_mac_gpu_container.sh`
 - `run_windows_gpu_container.ps1`

4.3.4. Experimentos de escalabilidad multinodo

- **Carpeta:** multi-node
- **Script:**
 - `run_ubuntu_native.sh`
- **Descripción:** Distribuye las subpoblaciones entre varios nodos utilizando una única hebra por nodo, evaluando el rendimiento nativo en sistemas distribuidos.
- **Variantes:**
 - Versiones para contenedores:
 - `run_ubuntu_container.sh`
 - `run_mac_container.sh`
 - `run_windows_container.ps1`
 - Versiones para GPU:
 - `run_ubuntu_gpu_container.sh`
 - `run_mac_gpu_container.sh`
 - `run_windows_gpu_container.ps1`

4.3.5. Barrido de hebras

- **Carpeta:** thread-sweep
- **Script:**

- `run_ubuntu_native.sh`
- **Descripción:** Ejecuta todas las combinaciones posibles de número de nodos y hebras por nodo, permitiendo identificar configuraciones óptimas y evaluar el comportamiento del programa en diferentes escenarios.
- **Variantes:**
 - Versiones para contenedores:
 - `run_ubuntu_container.sh`
 - `run_mac_container.sh`
 - `run_windows_container.ps1`
 - Versiones para GPU:
 - `run_ubuntu_gpu_native.sh`
 - `run_ubuntu_gpu_container.sh`
 - `run_mac_gpu_container.sh`
 - `run_windows_gpu_container.ps1`

4.3.6. Ejecución automatizada

- **Carpeta:** `utils`
- **Script:**
 - `run_ubuntu_all.sh`
 - `run_mac_all.sh`
 - `run_windows_all.ps1`
 - `run_cluster_all.sh`
- **Descripción:** Estos scripts agrupan y ejecutan automáticamente todos los experimentos correspondientes a cada plataforma o entorno, facilitando la ejecución secuencial de múltiples pruebas según la metodología definida.

4.4. Repositorio del proyecto

Todo el trabajo desarrollado en este TFG, incluyendo scripts, configuraciones, documentación y resultados de los experimentos, está recogido y disponible públicamente en un repositorio de GitHub¹.

¹<https://github.com/FerniCuesta/DockEEG>

Capítulo 5

Experimentación

5.1. Resultados de los Experimentos

5.1.1. Experimentación inicial

Determinación del número óptimo de subpoblaciones

Estudio del rendimiento al requerir más hebras de las disponibles

Estudio del rendimiento al utilizar la misma GPU en todos los nodos

5.1.2. Pruebas Mononodo

Ejecución Nativa

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Nativo

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Windows

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Mac

Solo CPU

5.1.3. Pruebas Multinodo

Ejecución Nativa

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Nativo

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Windows

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Mac

Solo CPU

5.1.4. Barrido de Hebras

Ejecución Nativa

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Nativo

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Windows

Solo CPU

CPU + GPU

Contenedores en Mac

Solo CPU

Capítulo 6

Conclusiones y trabajo futuro

[En este capítulo se presentan las conclusiones obtenidas al llevar a cabo el presente trabajo]

6.1. Contribuciones

[En esta sección se presentan las principales contribuciones del trabajo realizado.]

- Contribución 1 ...
- Contribución 2 ...

6.2. Retos y trabajo futuro

[Exponer aquí los retos y trabajos futuros.]

Capítulo 7

Bibliografía

Bibliografía

- [1] P. Sharma, L. Chaufournier, P. Shenoy, and Y. Tay, “Containers and virtual machines at scale: A comparative study,” in *Proceedings of the 17th International Middleware Conference*, ACM. Trento, Italy: ACM, 2016, pp. 1–13.
- [2] G. Sravanthi, B. Grace, and V. Kamakshamma, “A review of high performance computing,” *IOSR Journal of Computer Engineering (IOSR-JCE)*, vol. 16, no. 1, Ver. VII, pp. 36–43, Feb 2014, e-ISSN: 2278-0661, p-ISSN: 2278-8727. Department of Computer Science, PBR Visvodaya Institute of Science And Technology, India. [Online]. Available: <http://www.iosrjournals.org>
- [3] G. Bhatia, “The road to docker: A survey,” *International Journal of Advanced Research in Computer Science*, vol. 8, pp. 83–87, 2017. [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:188398107>
- [4] H. Gantikow, “Rootless containers with podman for hpc,” in *Lecture Notes in Computer Science*, 2020. [Online]. Available: https://doi.org/10.1007/978-3-030-59851-8_23
- [5] L. Stephey, S. Canon, A. Gaur, D. Fulton, and A. J. Younge, “Scaling podman on perlmutter: Embracing a community-supported container ecosystem,” in *2022 IEEE/ACM 4th International Workshop on Containers and New Orchestration Paradigms for Isolated Environments in HPC (CANOPIE-HPC)*, IEEE/ACM. Berkeley, CA, USA: IEEE, 2022, laurie Stephey, Shane Canon, Aditi Gaur (now at Microsoft Azure), Daniel Fulton (NERSC, Lawrence Berkeley National Laboratory), Andrew J. Younge (Center for Computing Research, Sandia National Laboratories). [Online]. Available: <https://doi.org/10.1109/CANOPIE-HPC56686.2022.00009>
- [6] N. Zhou, H. Zhou, and D. Hoppe, “Containerisation for high performance computing systems: Survey and prospects,” *Journal of Software Engineering*, vol. X, no. X, May 2022, this is the authors’ version.

-
- [7] P. Vaillancourt, J. E. Coulter, R. Knepper, and B. Barker, “Self-scaling clusters and reproducible containers to enable scientific computing,” *2020 IEEE High Performance Extreme Computing Conference (HPEC)*, pp. 1–8, 2020. [Online]. Available: <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:220128332>
 - [8] J. J. Escobar, “Energy-efficient parallel and distributed multi-objective feature selection on heterogeneous architectures,” Ph.D. dissertation, Universidad de Granada, 2020.
 - [9] J. J. Escobar, J. Ortega, A. F. Díaz, J. González, and M. Damas, “Time-energy analysis of multilevel parallelism in heterogeneous clusters: the case of eeg classification in bci tasks,” *The Journal of Supercomputing*, vol. 75, no. 7, pp. 3397–3425, 2019. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1007/s11227-019-02908-4>

