Virtualización y Contenedores en Cómputo Científico

Hermilo Cortés González

Escuela de Gobierno y Transformación Pública
Data Pub

28 de mayo de 2024

Centros de Super Cómputo

Figura: Barcelona Supercomputing Center

Centros de Super Cómputo

Centros de Super Cómputo : Recurso compartido

- **Usuaria-Clienta**. Relacionadas con un grupo o institución.
- **Administradoras**. Satisfacen distintas necesidades de las clientas:
  - Versiones de software.
  - Compiladores.
  - Módulos.
  - Sistemas de archivos.
  - Permisos.

Arquitectura de un Cluster de HPC (High Perfomance Computing)

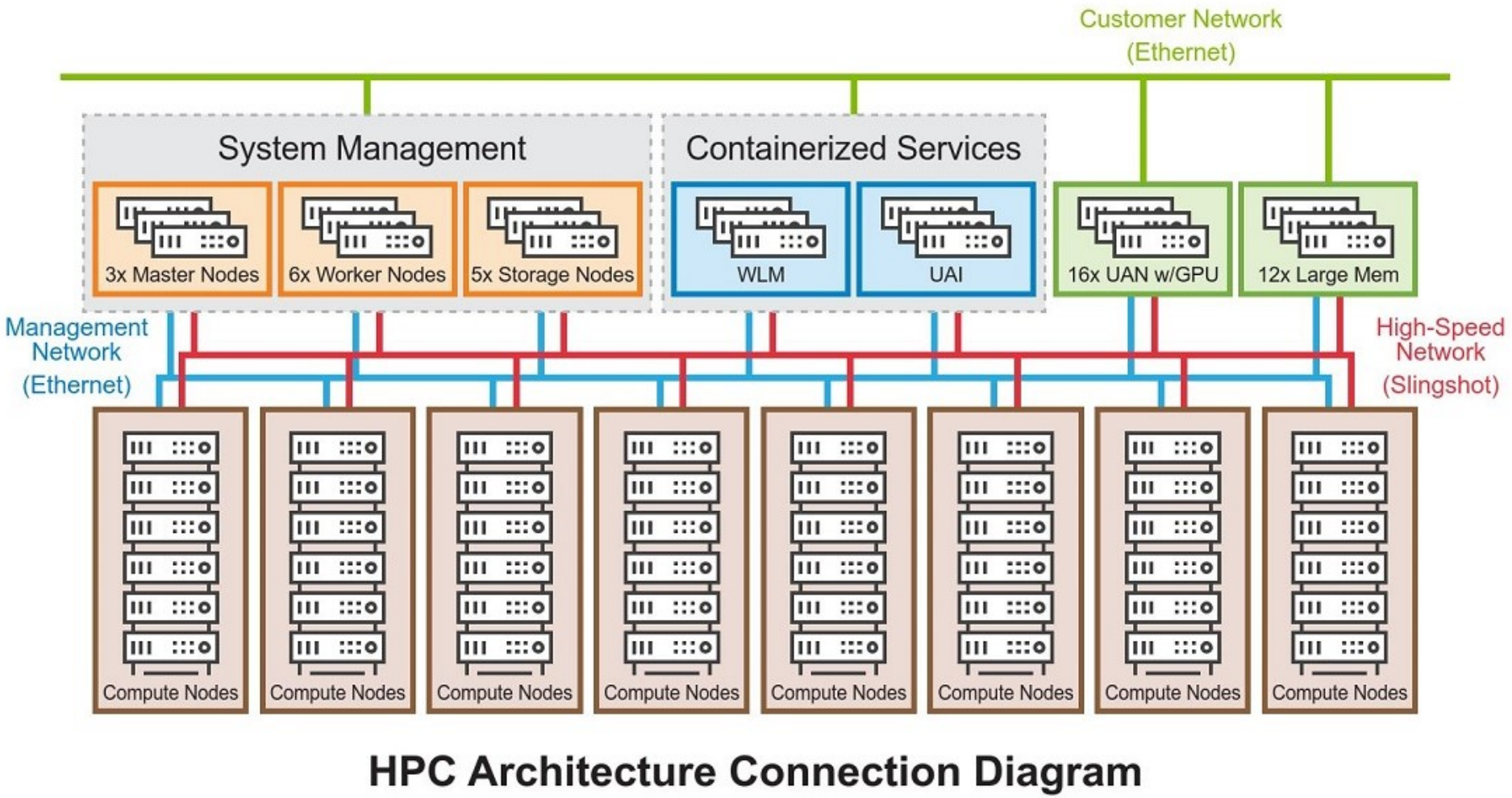


Figura: Tomado de `https://www.gigabyte.com/Article/high-performance-computing-cluster`

¿Cómo se administra un Cluster con miles de nodos?

Herramientas de configuración automatizada

Job Scheduler o Resource Management System(RMS)

Dos visiones

Administradoras
Se aseguran que la clienta-usuaria tenga las herramientas y soporte necesario para el uso eficiente de los recursos.

Usuarias
Consume los recursos.

Un buen sysadmin

¡Hola a todos!

El sábado por la noche alguien sometió un job tan intenso que un interruptor eléctrico se sobrecalentó e hizo su chamba, o sea, interrumpió el suministro al cluster bajo la sospecha de que había un corto y para impedir un incendio.

Me da gusto que se esté usando nuestra computadora a todo lo que da, me da disgusto que la red eléctrica no aguante. Este no es un problema tan serio pero requiere intervenciones que ya iremos programando.

Mientras tanto, volvamos al business as usual. Si se vuelve a caer el cluster ya sabemos qué es, avísenme si lo notan antes que yo. Tocará esperar a que yo venga físicamente al laboratorio a restablecer el interruptor paranóico.

Saludos atentos,

Rodrigo García

--

Has recibido este mensaje porque estás suscrito al grupo "Cluster LANCIS" de G

Todo parece estar bien ...

La realidad puede ser otra...

Problema

- Como en todo aquello donde existe el uso de un recurso compartido, las relaciones Sysadmin-Usuaria, Usuaria-Usuaria no son siempre coordiales.
- Hay conflicto : ¿Quién y cuándo tiene acceso al recurso?¿Hay asignación justa de recursos?¿Hay usuarios con mayores privilegios?
- **Sysadmin** : Definen **Reglas-Políticas de uso** con el objetivo de satisfacer las necesidades de las usuarias pero también acorde a las necesidades de mantener un recurso usable y confiable.
- **Usuaria** : Estas reglas y políticas se traduce en sistemas y software limitantes e inmóviles (Kurtzer et al., 2017).

Problema

This static nature coupled with distribution-specific software builds meant that service providers would ultimately end up limiting the scope of computational science that their systems could support(Kurtzer et al., 2017)

Propuesta de solución(Kurtzer et al., 2017)

Ambientes portables $\rightarrow$ Virtualización

Virtual machines have finally arrived. Dismissed for a number of years as merely academic curiosities, they are now seen as cost-effective techniques for organizing computer systems resources to provide extraordinary system flexibility and support for certain unique application (Goldberg, **¿?**)

Propuesta de solución(Kurtzer et al., 2017)

Ambientes portables $\rightarrow$ Virtualización

Virtual machines have finally arrived. Dismissed for a number of years as merely academic curiosities, they are now seen as cost-effective techniques for organizing computer systems resources to provide extraordinary system flexibility and support for certain unique application (Goldberg, 1974)

Virtualización. Definiciones (Bugnion et al., 2017)

- **Virtualización** : es la intermediación entre una capa compleja o fragmentada a una interfaz simplificada que pueda ser expuesta o utilizada por múltiples usuarias, donde el recurso virtual expuesto es idéntico al recurso físico subyacente que se está virtualizando (Bugnion et al., 2017; Ward, 2021).
- **Máquina virtual** : es un ambiente de cómputo completo con capacidades propias aisladas de procesamiento, memoria y canales de comunicación.
- **Hipervisor** : pieza especializada del sistema de software que administra y ejecuta las máquinas virtuales.
- **Virtual machine monitor (VMM)**: subsistema del hipervisor que se enfoca en la virtualización del CPU y la memoria.

Técnicas de virtualización

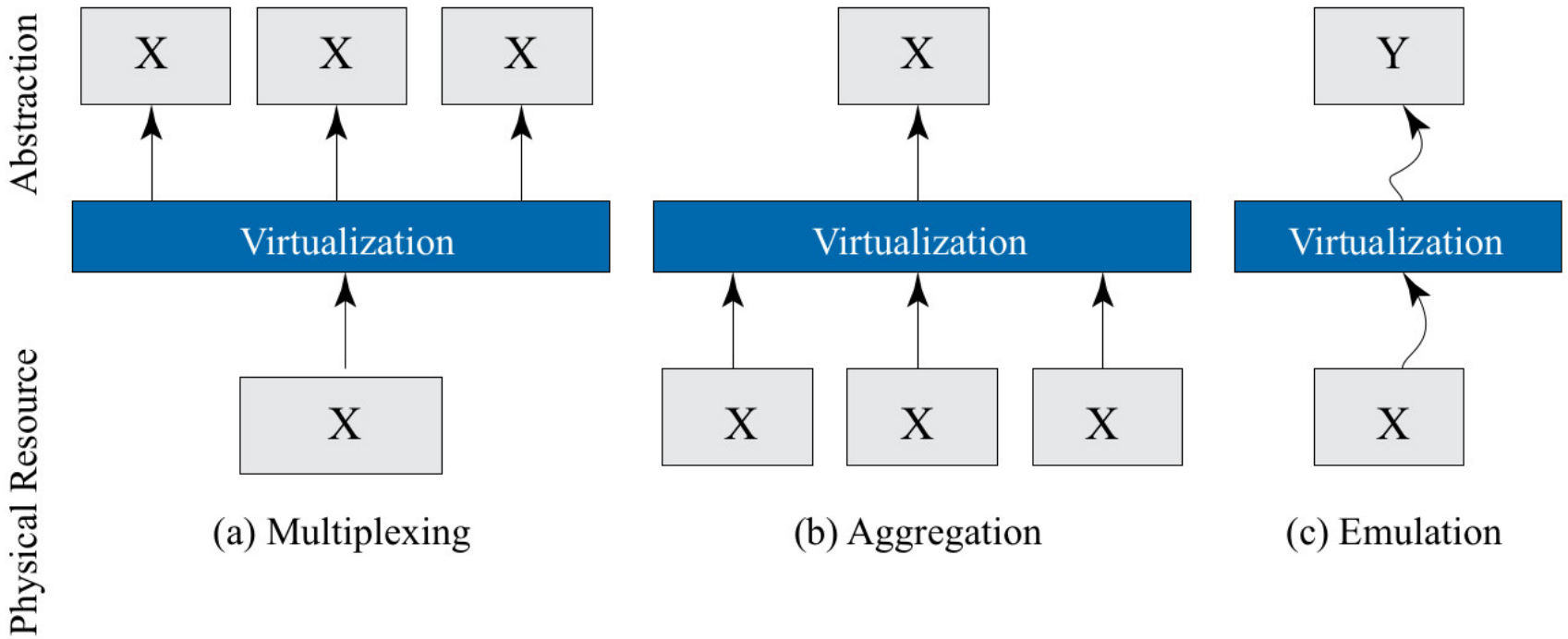


Figure 1.1: Three basic implementations techniques of virtualization. X represents both the physical resource and the virtualized abstraction.

Figura: Tomado de Bugnion et al. (2017)

Clasificación de Máquinas Virtuales

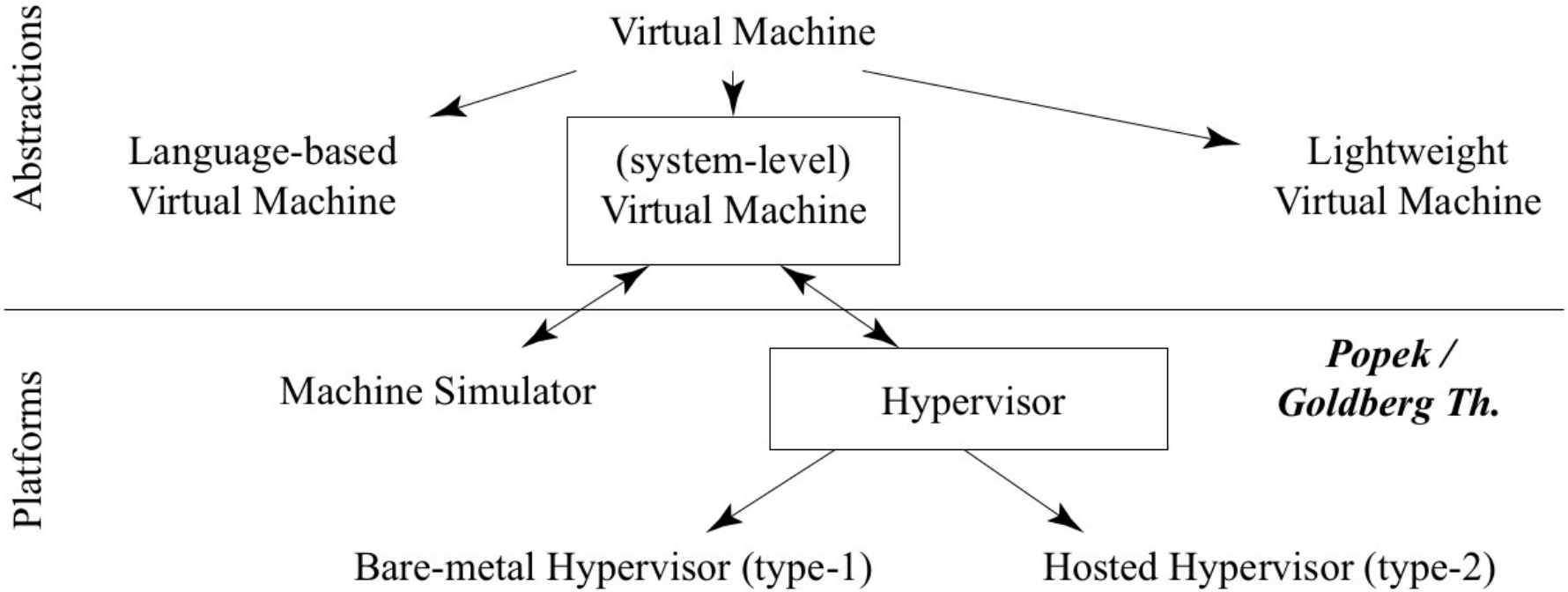


Figure 1.2: Basic classification of virtual machines and the platforms that run them.

Figura: Tomado de Bugnion et al. (2017)

Máquinas virtuales

- Introducen una sobrecarga computacional considerable debido al nivel requerido de virtualización para emular el sistema operativo y el kernel.
- Tecnologías de virtualización en procesadores x86-64 aminoran esta sobrecarga (*e.g* VT-x de Intel[a] (Uhlig et al., 2005) y AMD-V de AMD)

[a] VT-x agrega un nuevo modo de ejecución: **root mode**. El hipervisor y el sistema operativo host se ejecutan en **root mode** mientras que las máquinas virtuales se ejecutan en **non-root mode**

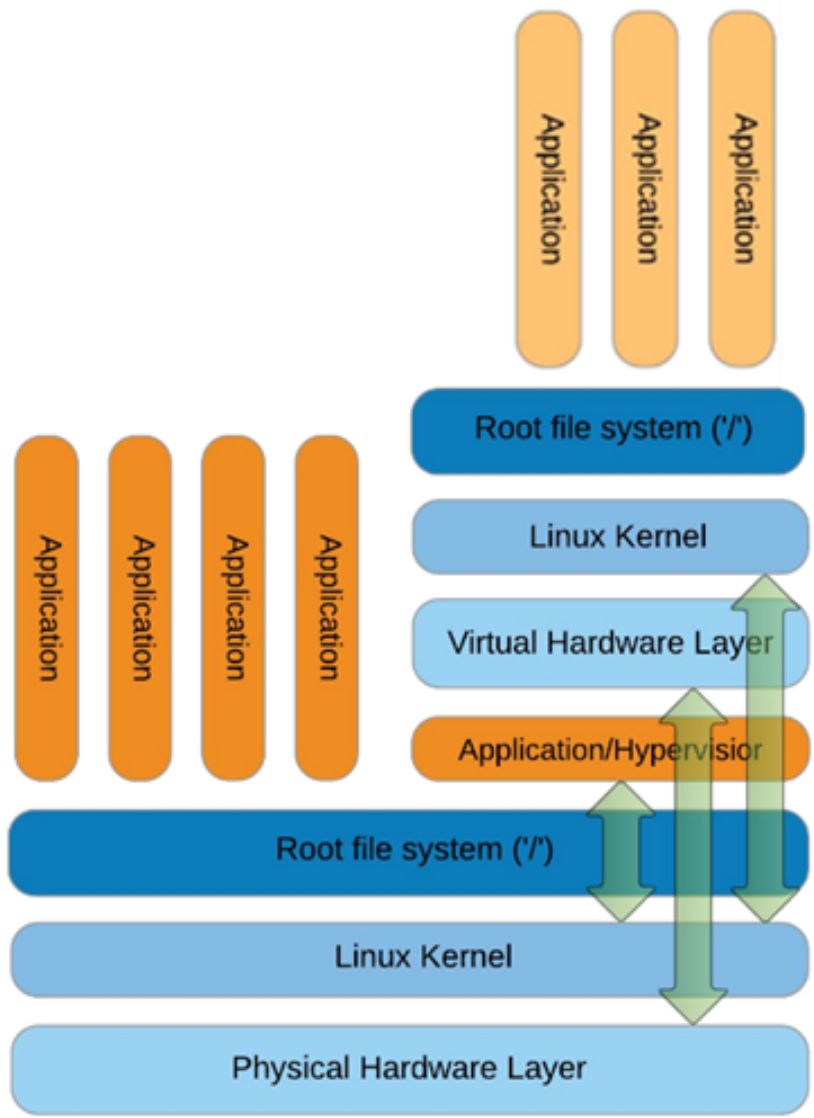


Figura: Tomado de Greg Kurtzer keynote at HPC Advisory Council 2017 @ Stanford

Máquinas virtuales

Contenedores

- Las tecnologías de contenedores utilizan el kernel del host. Aplicaciones dentro del contenedor se ejecutan con el mismo desempeño que aplicaciones nativas del SO.
- Virtualización más ligera.
- Las características específicas del kernel son las que se ocupan de aislar procesos, en particular (Nemeth et al., 2018):
  - **Namespaces**[a].
  - **Control groups (cgroups)**[b].

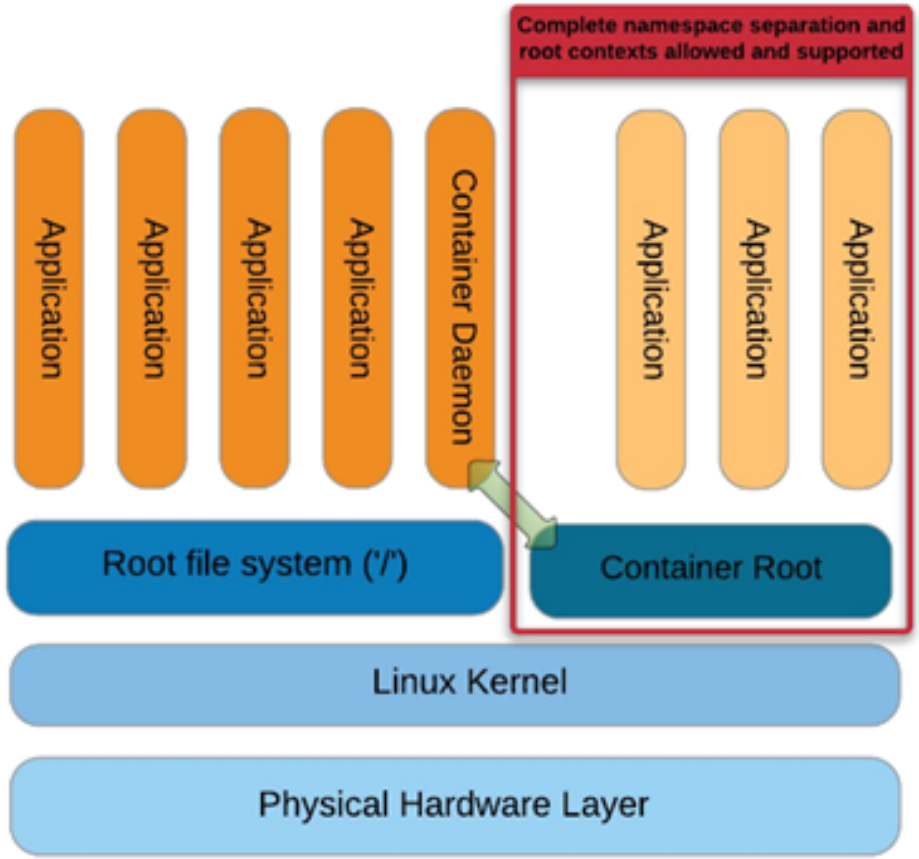


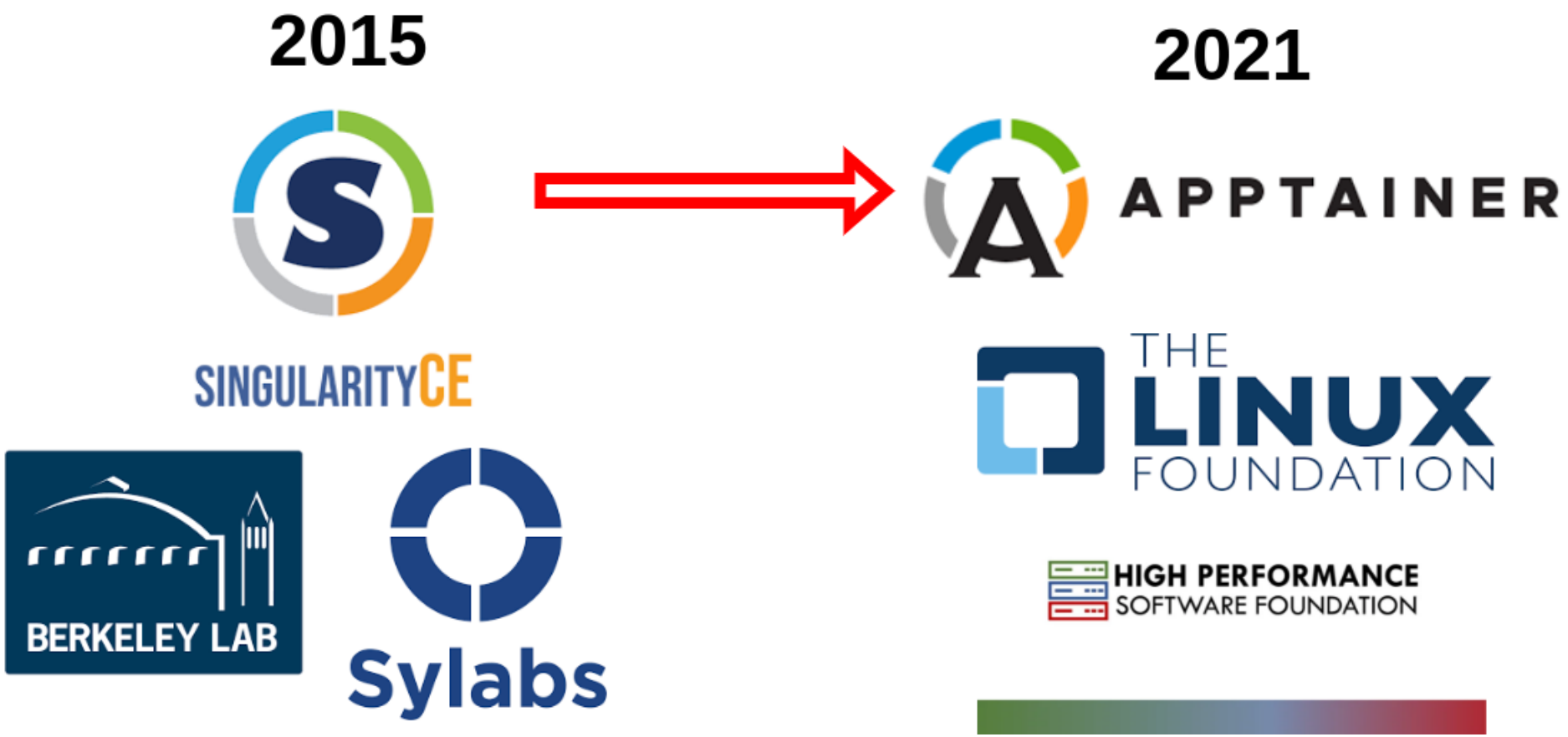
Figura: Arquitectura General de un Contenedor. Tomado de Greg Kurtzer keynote at HPC Advisory Council 2017 @ Stanford

[a] Aislan los procesos del contenedor desde la perspectiva de las características del sistema operativo

[b] Limita el uso de los recursos del sistema y prioriza ciertos procesos sobre otros

Contenedores

Apptainer : Application containers for Linux



Gregory Kurtzer

Gregory Kurtzer

SINGULARITYCE

Rocky Linux™

Objetivos de Apptainer (Kurtzer et al., 2017)

- **Mobility of compute (Portabilidad)**
- **Reproducibilidad**
- **Soporte e integración con recursos tradicionales de HPC**

Mobility of compute

- Capacidad de definir, crear y mantener un workflow local que puede ser usado con confianza en diferentes hosts, sistemas operativos de Linux, provedores de servicios en la nube, etc.
- Esencial para la *ciencia reproducible*.
- Apptainer usa un formato de imagen distribuible que encapsula el contenido completo del contenedor en un **archivo de imagen único** (archivo **.sif**).

Mobility of compute

- El archivo .sif es la representación completa de todos los archivos dentro del contenedo.
- El .sif encapsula el sistema operativo así como también todas las dependencias necesarias para ejecutar un workflow definido.
- Este archivo puede ser copiado, compartido, mejorado, además de seguir el estándar de permisos de UNIX.

Reproducibilidad

- Si se garantiza portabilidad, se garantiza reproducibilidad.
- Una vez que se ha definido el workflow dentro de contenedor, el archivo .sif puede usarse con confianza que el código dentro del contenedor no ha sido modificado.
- Apptainer utiliza un método de validación de integridad mediante un hash por SHA256 que garantiza que la imagen del contenedor que es distribuida no ha sido modificada.
- Cuando las investigadoras publican sus resultados, pueden distribuir el .sif de la imagen utilizada en el artículo así como su hash, permitiendo que alguien más pueda validar los resultados y confirmar la integridad del .sif descargado con el hash.

Soporte e integración con recursos tradicionales de HPC

Apptainer soporta de forma nativa tecnologías como :

- Infiniband y Lustre (comunicación en red de alta velocidad y baja latencia y sistema de archivos paralelo, respectivamente).
- SLURM, Torque, etc (Sistemas de administración de recursos).
- Aceleradores: GPUs, TPUs.
- Software tradicional de HPC: OpenMP, MPI.

Esto como resultado que Apptainer se ejecuta como cualquier otro comando del sistema.

Casos de Uso

Investigaciones académicas

- Desarrollan en ambiente local, escalan la ejecución en otra infraestructura.
- Publican resultados y distruyen el análisis completo y el workflow dentro de un .sif acompañado del hash, permitiendo la reproducción y validación de resultados.

Casos de Uso

Administración de sistemas

- El sistema de HPC es controlado y administrado por una administradora de sistemas y su equipo.
- Para mantener el sistema seguro, sólo a este grupo se le concede acceso root y control sobre el estado del sistema operativo.
- Los usuarios del sistema no tiene acceso como root.
- Si un usuario puede escalar a root (incluso dentro de un contenedor) en el sistema, el usuario puede potencialmente hacer cosas malas (deliberadamente o no).

Casos de Uso

Administración de sistemas

- Para mitigar estos riesgos, Apptainer no proporciona la capacidad de escalar permisos dentro de contenedor.
- Con Apptainer **si un usuario no tiene acceso a root en el sistema objetivo, tampoco puede escalar privilegios como root dentro del contenedor**.
- La sysadmin instruiría a las usuarias a desarrollar sus imágenes en un sistema donde tengan acceso a root para realizar operaciones de escritura en las imágenes, para posteriormente transferirlas al cluster para su ejecución a gran escala.

Casos de Uso

Eliminar redundancia en tecnologías de contenedores

- Es posible ejecutar imágenes de Docker en ambientes HPC con Apptainer.
- Por diseño, Apptainer ha sido desarrollado para trabajar sin problemas con Docker.

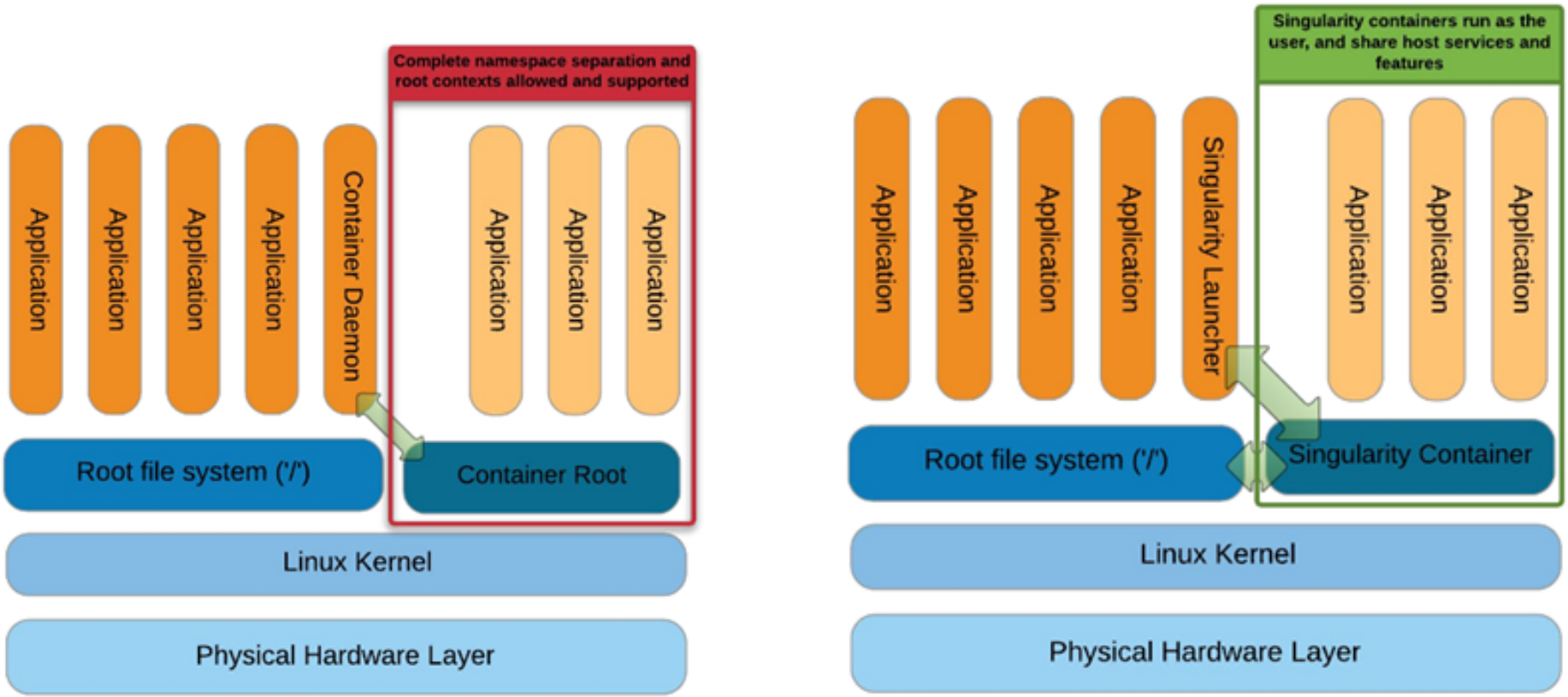
¿Por qué no sólo usar Docker en ambientes HPC?

Problemas de seguridad

- Para cada contenedor que Docker ejecuta, el proceso del contenedor es extendido como hijo del demonio de Docker que es propiedad de root.
- Como la usuaria es capaz de interactuar y controlar el demonio de Docker, teóricamente es posible obligar al proceso del demonio a otorgar permisos privilegiados a la usuaria[1].

[1] Uno de los principales retos en los centros HPC dedicados a la investigación es permitir a las usuarias ejecutar código arbitrario manteniendo simultaneamente que el sistema no se encuentra comprometido por código malicioso (intencionalmente malicioso o no).

Docker vs Apptainer



(a) Docker

(b) Apptainer

Figura: Tomado de Greg Kurtzer keynote at HPC Advisory Council 2017 @ Stanford

Workflow de Apptainer

- **Build**. Construye el contenedor de Apptainer en un sistema local donde tengas acceso a root o sudo.
- **Transfer**. Transfiere el contenedor a un sistema HPC donde quieres ejecutarlo.
- **Run**. Ejecuta el contenedor en el sistema HPC.

References I

Bugnion, E., Nieh, J., and Tsafrir, D. (2017). *Hardware and Software Support for Virtualization*. Morgan & Claypool Publishers.

Goldberg, R. P. (1974). Survey of virtual machine research. *Computer*, 7(6):34–45.

Kurtzer, G. M., Sochat, V., and Bauer, M. W. (2017). Singularity: Scientific containers for mobility of compute. *PloS one*, 12(5):e0177459.

Nemeth, E., Snyder, G., Hein, T. R., Whaley, B., and Mackin, D. (2018). Unix and linux system administration handbook. *USENIX Open Access Policy*, 59.

Uhlig, R., Neiger, G., Rodgers, D., Santoni, A. L., Martins, F. C., Anderson, A. V., Bennett, S. M., Kagi, A., Leung, F. H., and Smith, L. (2005). Intel virtualization technology. *Computer*, 38(5):48–56.

Ward, B. (2021). *How Linux works: What every superuser should know*. no starch press.