

GB-500: Introdução a Workflows Científicos e suas Aplicações

Professores: Luiz Gadelha, Kary Ocaña

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, P2/2018
Laboratório Nacional de Computação Científica

13 de março de 2018



Experimentos Científicos Computacionais

- ▶ Uma parte crescente da ciência e tecnologia se apoia em experimentos computacionais.
- ▶ Características destes experimentos:
 - ▶ grande quantidade de tarefas computacionais;
 - ▶ grande quantidade de dados;
 - ▶ dados armazenados em formatos diversos;
 - ▶ utilização de computação paralela e distribuída.

Introdução

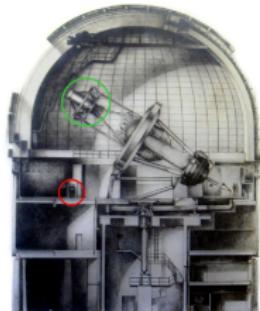
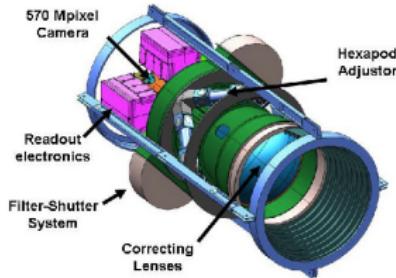
- ▶ Experimentos científicos computacionais (ou *in silico*) atingiram uma escala na qual:
 - ▶ é difícil tratá-los com recursos de apenas uma instituição;
 - ▶ é difícil gerenciá-los “manualmente” (scripts);
 - ▶ é difícil analisar os seus resultados, em função da quantidade de dados gerada.
- ▶ Estes experimentos são intensivos em termos de **processamento** e em termos de **dados**.

Introdução

- ▶ Exemplos:
 - ▶ Modelos climáticos mais recentes geram 8TB para uma simulação de 100 anos com resolução de 100km, e 8PB para resolução de 3km.
 - ▶ *Large Hadron Collider* gera 10PB de dados brutos por dia 15PB de dados tratados por ano.
 - ▶ O SKA (*Square Kilometre Array*) será composto por 3.000 rádio-telescópios de 15m de diâmetro. Envolve 70 instituições de 20 países. O volume de dados brutos gerado diariamente será de 1 Exabyte, (2x o que trafega pela Internet por dia atualmente). Volume pós-processamento: 300 Petabytes a 1,5 Exabyte por ano.

R. Kouzes et al. The Changing Paradigm of Data-Intensive Computing. *IEEE Computer*, 42(1):26-34, 2009.

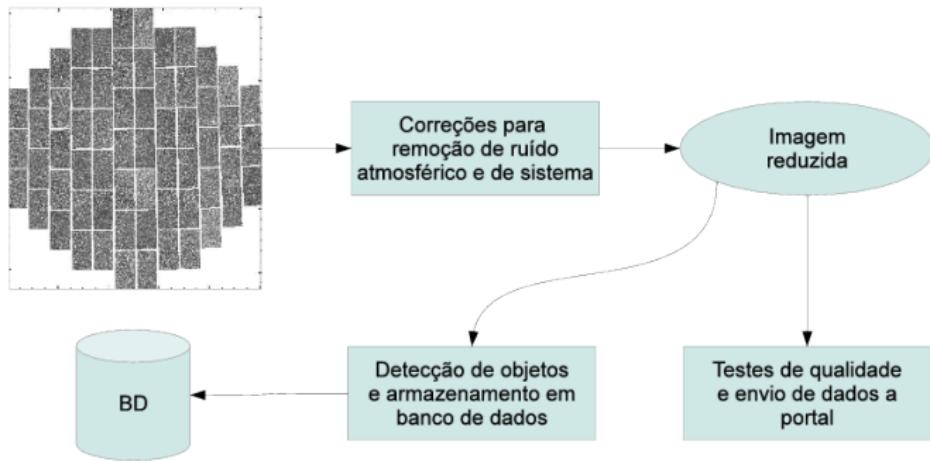
Exemplo: Dark Energy Survey (DES)



- ▶ Câmera de 570 megapixels.
- ▶ 400 imagens (6,6TB) por noite.

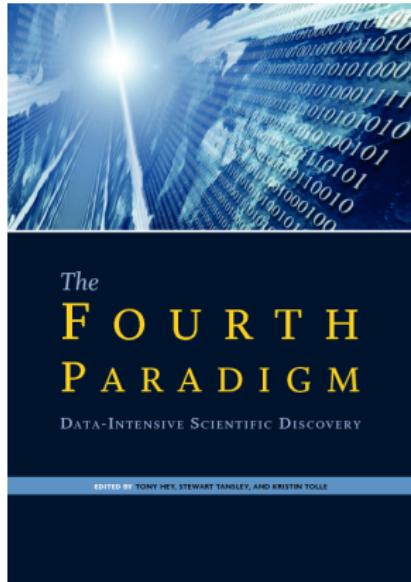
Fonte: Dark Energy Survey (<http://www.darkenergysurvey.org>)

Exemplo: Workflow do DES



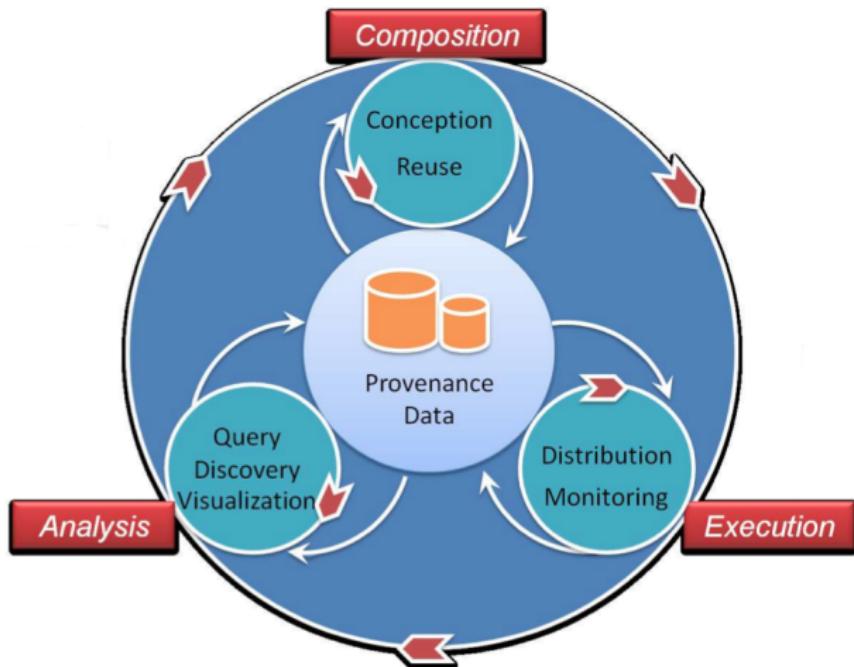
K. Kotwani et al. The Dark Energy Survey Data Management System as a Data Intensive Science Gateway. *Proc. of the 8th International Workshop on Middleware for Grids, Clouds and e-Science* (MGC 2010). ACM, 2010.

Quarto Paradigma Científico



- ▶ Paradigmas anteriores: empírico, teórico e computacional (simulação).
- ▶ Habilitado por instrumentos científicos e simulações que geram grandes massas de dados.
- ▶ O quarto paradigma é baseado na análise e exploração destas massas de dados. Também chamado de e-Ciência.

Ciclo de Vida de Experimentos Científicos



M. Mattoso, C. Werner, G. Travassos, V. Braganholo, E. Ogasawara, D. Oliveira, S. Cruz, W. Martinho, and L. Murta, Towards supporting the life cycle of large scale scientific experiments. *International Journal of Business Process Integration and Management* 5(1):79–92, 2010.

Ciclo de Vida de Experimentos Científicos

- ▶ **Composição.** Especificação das atividades e dos dados que serão utilizados. Pode incluir o reuso de especificações de experimentos similares.
- ▶ **Execução.** Mapeamento, distribuição e inicialização das atividades do experimento em tarefas concretas executadas em recursos computacionais. Inclui também o monitoramento das mesmas e a movimentação dos dados necessários.
- ▶ **Análise.** Avaliação do experimento através dos resultados obtidos, p. ex. dados de saída. Pode se basear também em consultas aos registros de eventos da execução (proveniência).

M. Mattoso et al. Desafios No Apoio à Composição De Experimentos Científicos Em Larga Escala. *Anais do XXXVI Seminário Integrado De Software e Hardware (SEMISH), XXIX Congresso Da Sociedade Brasileira De Computação (CSBC)*, p. 307-321, 2009.

Requisitos de Experimentos Científicos Computacionais

- ▶ **Abstração.** Deve ser possível ao cientista especificar o experimento em alto nível, sem precisar detalhar aplicações específicas e onde elas serão executadas.
- ▶ **Reprodutibilidade.** O experimento pode ser reproduzido por terceiros de forma independente.

D. Koop et al. A Provenance-Based Infrastructure for Creating Executable Papers. *Proceedings of the ICCS*, 2011.

- ▶ **Reutilização.** Deve ser possível reutilizar especificações de experimentos realizados previamente para concepção de novos experimentos.

Exemplo: MyExperiment (<http://www.myexperiment.org>).

- ▶ **Escalabilidade.** O experimento deve ser resiliente ao aumento do número de tarefas e da quantidade de dados.

Experimentos Científicos Computacionais em Larga Escala

- ▶ A execução deve ser escalável, ou seja, resiliente ao aumento do número de tarefas e da quantidade de dados.
- ▶ Experimentos em larga escala normalmente requerem o uso de computação paralela e distribuída:
 - ▶ **Computação paralela.** Utilização de múltiplos processadores de forma concorrente para reduzir o tempo de execução de atividades.
I. Foster. Designing and Building Parallel Programs: Concepts and Tools for Parallel Software Engineering. Addison-Wesley, 1994.
 - ▶ **Computação em grade.** Compartilhamento de recursos computacionais heterogêneos e distribuídos.
I. Foster e C. Kesselman, Eds. The Grid 2: Blueprint for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann, 2003.
 - ▶ **Computação na nuvem.** Utilização de recursos de terceiros.
D. Oliveira, F. Baião e M. Mattoso. Towards a Taxonomy for Cloud Computing from an e-Science Perspective. Cloud Computing, pp. 47–62. Springer, 2010.

Escalabilidade de Experimentos Científicos Computacionais

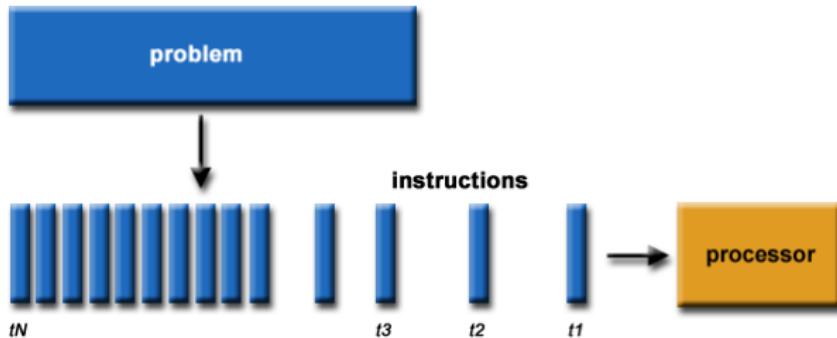
- ▶ O tempo total de execução de uma computação paralela e distribuída é dado por:

$$t = t_{\text{processando}} + t_{\text{comunicando}} + t_{\text{ocioso}}$$

- ▶ Existem diversas ferramentas para análise de performance de aplicações de forma isolada.
- ▶ Um desafio é realizar o mesmo tipo de análise para experimentos científicos computacionais, compostos por muitas aplicações.
- ▶ A escalabilidade depende da orquestração da execução de tarefas e gerência de dados de forma eficiente.

Computação Paralela

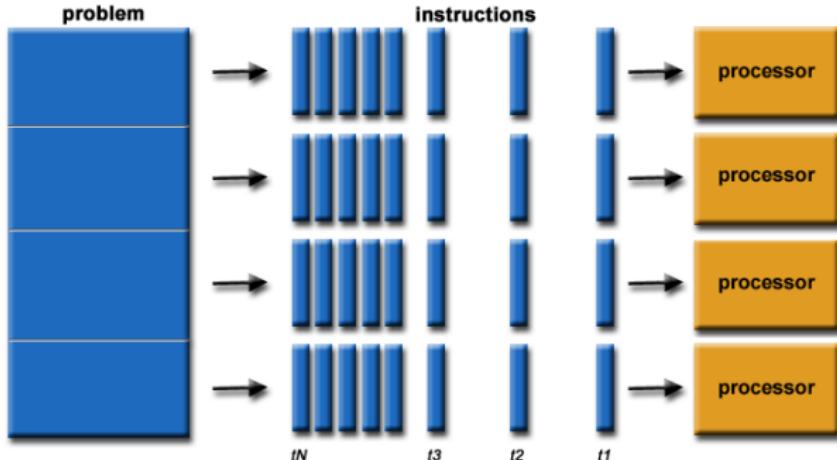
- ▶ Computação serial:



Fonte: Blaise Barney. Introduction to Parallel Computing. Lawrence Livermore National Laboratory.
https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/

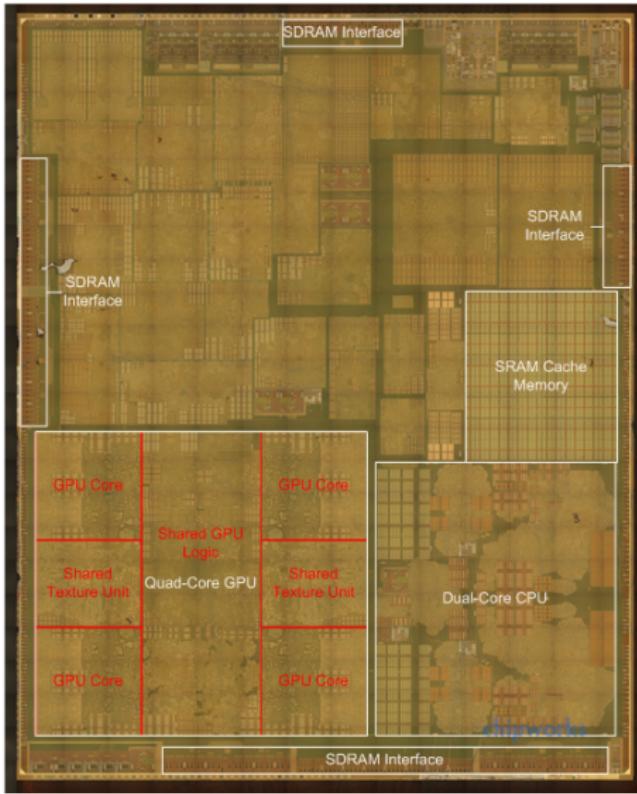
Computação Paralela

- ▶ Computação paralela:



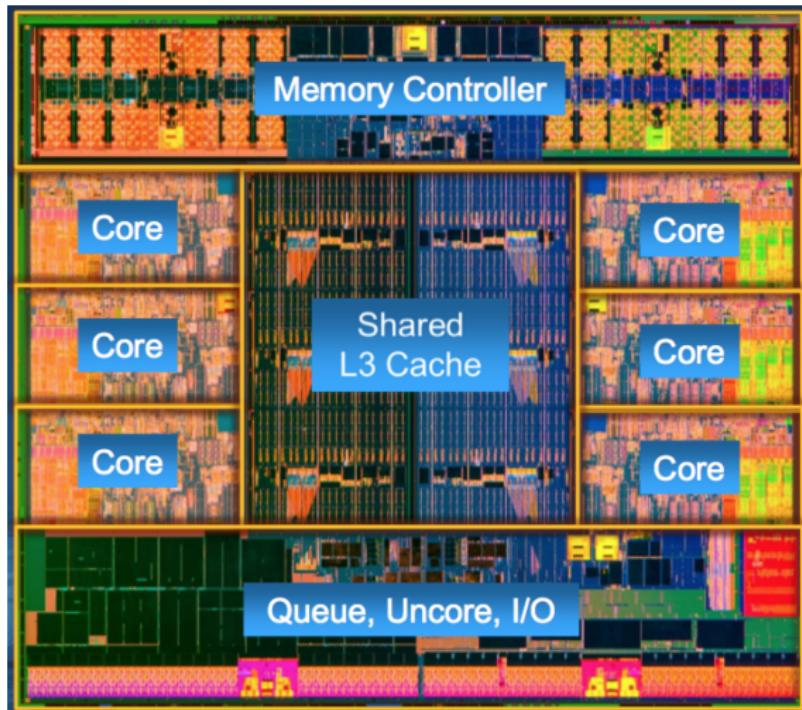
Fonte: Blaise Barney. Introduction to Parallel Computing. Lawrence Livermore National Laboratory.
https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/

Computação Paralela



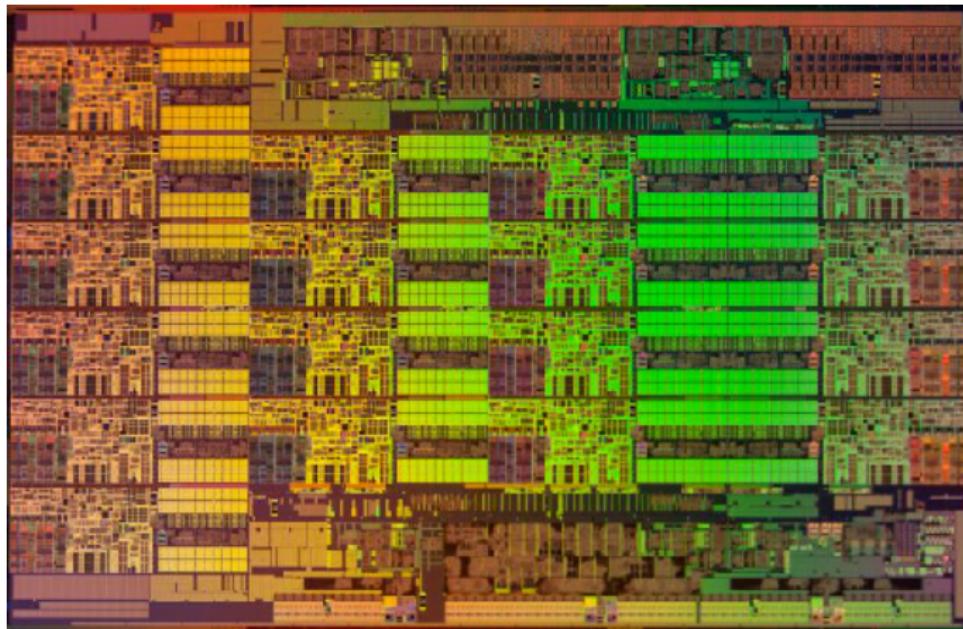
Processador Apple A8 (iPhone 6) com 2 núcleos de processamento. Fonte: Chipworks.

Computação Paralela



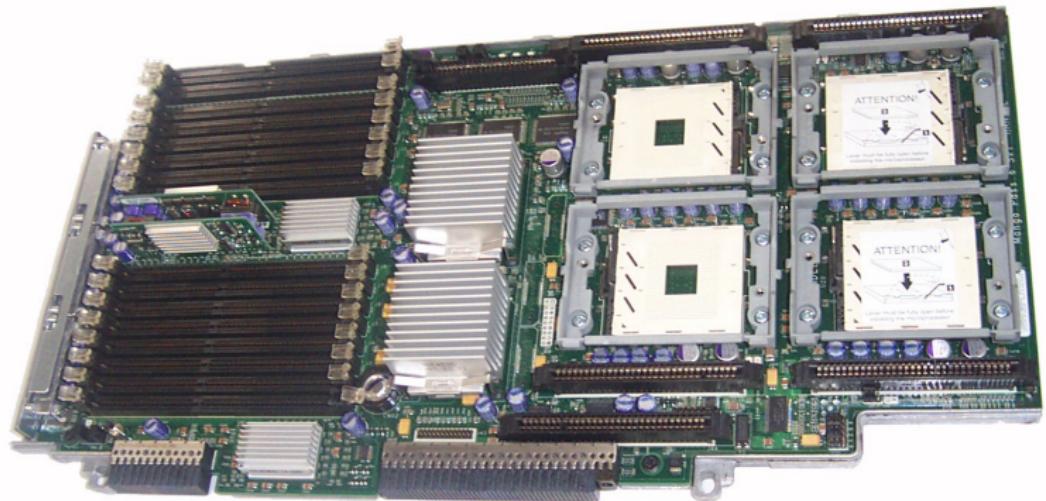
Processador Intel i7-4960X com 6 núcleos de processamento. Fonte: Intel.

Computação Paralela



Processador Intel Xeon E7-8895 v3 com 18 núcleos de processamento. Fonte: Intel.

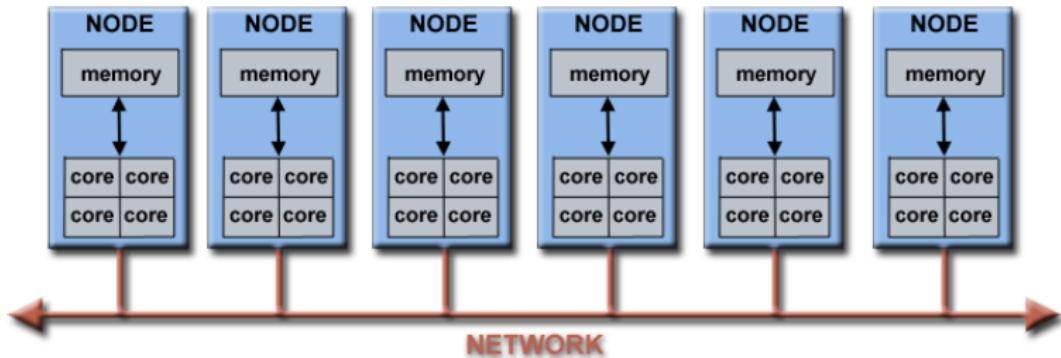
Computação Paralela



IBM EServer xSeries 445 SMP Board. Fonte: IBM.

Computação Paralela

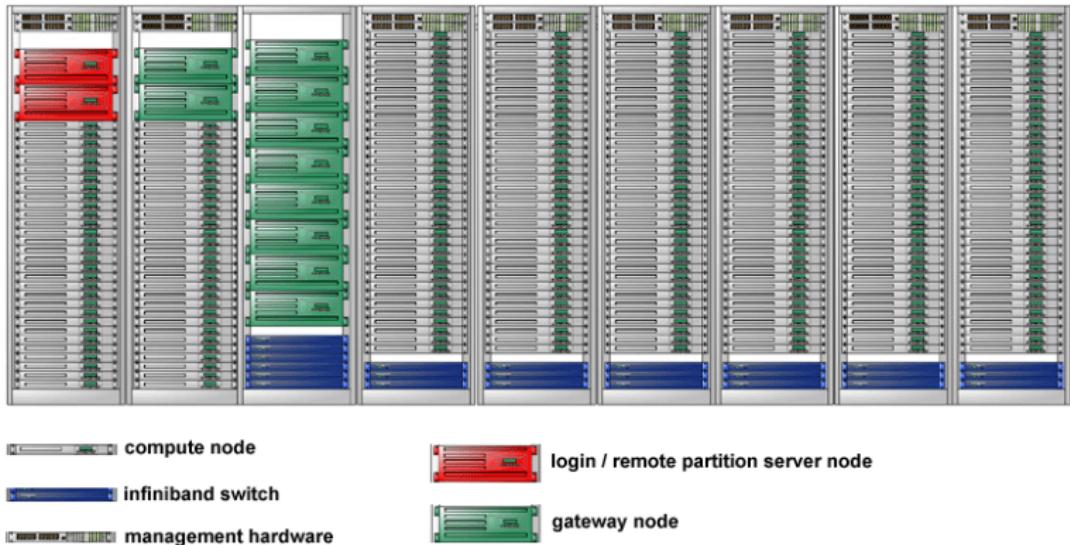
- ▶ Cluster de computadores:



Fonte: Blaise Barney. Introduction to Parallel Computing. Lawrence Livermore National Laboratory.
https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/

Computação Paralela

- ▶ Cluster de computadores:



Fonte: Blaise Barney. Introduction to Parallel Computing. Lawrence Livermore National Laboratory.
https://computing.llnl.gov/tutorials/parallel_comp/

Grades Computacionais

- ▶ A realização destes experimentos requer o compartilhamento de recursos computacionais distribuídos.
- ▶ Computação em grade permite ganhos de escala em termos de processamento.
- ▶ Gerência de dados em grades é uma área em desenvolvimento.

Foster, I. (2001). The Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations. *International Journal of High Performance Computing Applications*, 15(3), 200–222.

<http://doi.org/10.1177/109434200101500302>

- ▶ Problemas em gerência de dados distribuída:
 - ▶ armazenamento, acesso e replicação dados: SRB, iRODS;
 - ▶ gerência de workflows: Kepler, Swift (Globus), Taverna;
 - ▶ gerência de metadados: Chimera;
 - ▶ processamento de consultas de alto nível: OGSA DAI/DQP.

A. Chervenak, I. Foster, C. Kesselman, C. Salisbury, S. Tuecke. The Data Grid: Towards an Architecture for the Distributed Management and Analysis of Large Scientific Datasets. *Journal of Network and Computer Applications*, 23:187-200, 2001.

E. Pacitti, P. Valduriez, M. Mattoso. Grid Data Management: Open Problems and New Issues. *Journal of Grid Computing*, 5(3):273-281, 2007.

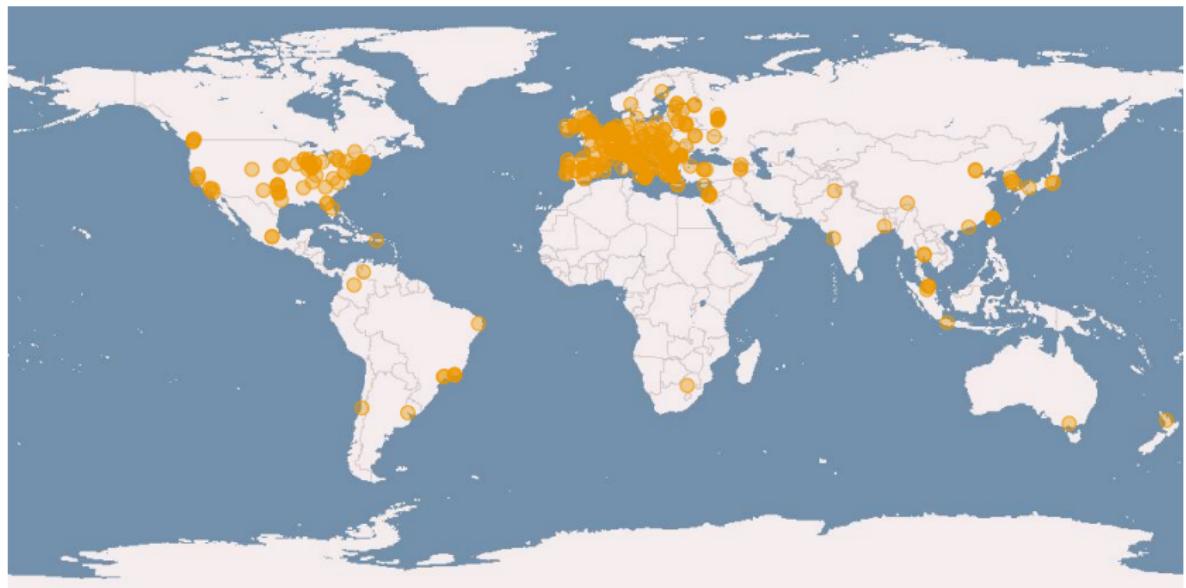
Grades Computacionais

- ▶ Uma **grade computacional** é uma infra-estrutura composta de software e hardware que provê recursos computacionais de alto desempenho.
- ▶ Tais recursos podem estar distribuídos entre múltiplas instituições sob domínios administrativos distintos.
- ▶ O *Globus* é um conjunto de ferramentas para implementação de grades computacionais.

Exemplo: Large Hadron Collider (LHC)

- ▶ Colisor de partículas de 27km de circunferência localizado na fronteira da França e Suíça.
- ▶ Projeto colaborativo envolvendo cerca de 100 países e 10.000 cientistas.
- ▶ Composto por seis detectores que geram cerca de 15PB de dados por ano.
- ▶ LHC Computing Grid (LCG):
 - ▶ Estrutura de computação distribuída organizada de forma hierárquica, para execução de diferentes partes do workflow do experimento:
 - ▶ Tier 0: processamento de dados brutos dos detectores,
 - ▶ Tier 1: reconstrução e pré-processamento,
 - ▶ Tier 2: simulação e análise.

Exemplo: Mapa do LCG

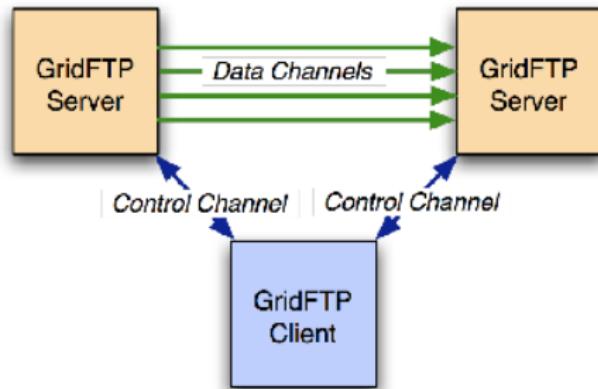
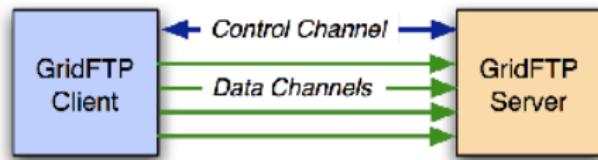


Fonte: CERN (<http://gstat-prod.cern.ch>)

Grades Computacionais

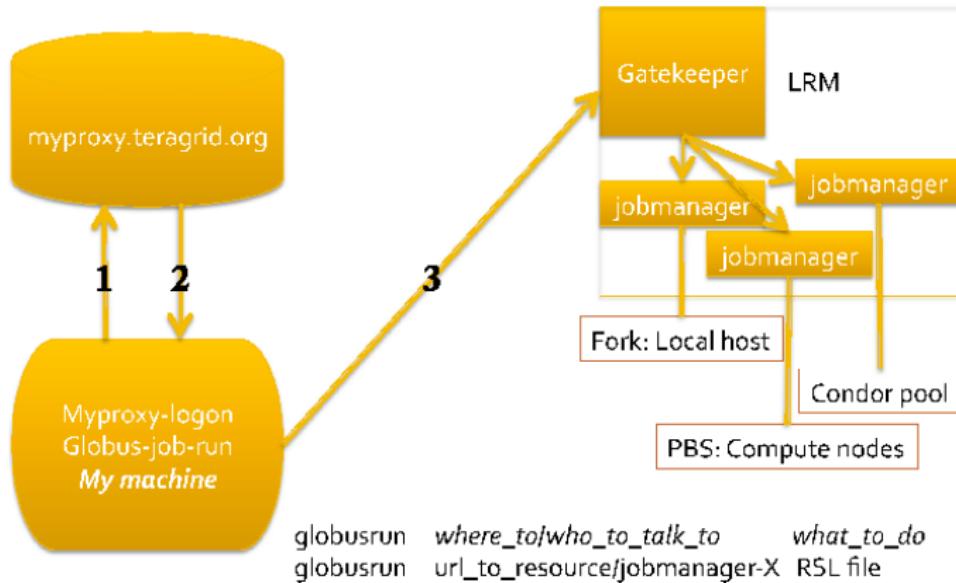
- ▶ Principais serviços:
 - ▶ Globus Resource Allocation Manager (GRAM): gerenciador de recursos computacionais, recebe submissão de tarefas e as repassa para o gerenciador de execução local (*fork*, fila de execução).
 - ▶ GriffFTP: transferência de arquivos entre domínios administrativos.

GridFTP



Fonte: XSEDE (<http://www.xsede.org>)

GRAM



Fonte: XSEDE (<http://www.xsede.org>)

Computação na Nuvem

- ▶ Consiste das aplicações disponibilizadas como serviços através da Internet e da infraestrutura (hardware e software) necessária para disponibilizá-las.
- ▶ Diferentes tipos de serviços:
 - ▶ *Software as a Service* (SaaS): Google Docs.
 - ▶ *Platform as a Service* (PaaS): Google App Engine, Amazon Lambda.
 - ▶ *Infrastructure as a Service* (IaaS): Amazon EC2.
- ▶ Tipos de nuvem:
 - ▶ Pública: disponível ao público em geral, cobrada conforme utilização.
 - ▶ Privada: não disponível ao público em geral (interna a uma organização).

Armbrust, M. et al. (2010). A view of cloud computing. Communications of the ACM, 53(4), 50-58.

Computação na Nuvem

- ▶ Algumas características que distinguem uma nuvem de um CPD/*Data Center*:
 - ▶ Percepção pelo usuário de recursos “infinitos” (**elasticidade**), i.e. quantidade de recursos alocados pode ser ajustada dinamicamente em questão de minutos.
 - ▶ Usuários não precisam adquirir antecipadamente recursos computacionais para seus projetos conforme capacidade planejada de um serviço.
 - ▶ Além de elásticos, os serviços podem ser contratados por períodos curtos de tempo (p.ex. horas).
 - ▶ Ganhos de escala através do uso de *data centers* muito grandes permitem que provedores de computação na nuvem ofereçam serviços a custos competitivos.
 - ▶ Maximização da utilização através do compartilhamento de recursos por vários clientes.

Computação na Nuvem



Data Center da Google em The Dalles, Oregon, Estados Unidos. Fonte: Wikimedia.

Big Data

- ▶ Processamento de grandes volumes de dados, ou de dados que sejam gerados a taxas muito altas.
- ▶ Exemplo: indexação e busca na Web (*PageRank*).
- ▶ Plataformas do tipo MapReduce, como o Hadoop, são comumente utilizadas para:
 - ▶ Aplicar uma função (*map*), como a contagem de palavras, a dados que estão distribuídos em diversos nós computacionais.
 - ▶ Agregar (*reduce*) os resultados do map (p.ex. máximo/mínimo, soma).
- ▶ O Spark implementa outras funções e otimizações, como a manutenção de conjuntos de dados em memória.

Jagadish, H. V. et al. (2014). Big data and its technical challenges. *Communications of the ACM*, 57(7), 86–94.

Dean, J., Ghemawat, S. (2008). MapReduce: simplified data processing on large clusters. *Communications of the ACM*, 51(1), 107.

Zaharia, M., et al. (2016). Apache Spark: a unified engine for big data processing. *Communications of the ACM*, 59(11), 56–65.

Obrigado!

E-mail: lgadelha@lncc.br