

# GB-500: Introdução a Workflows Científicos e suas Aplicações

Professores: Luiz Gadelha e Kary Ocaña

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, P3/2015  
Laboratório Nacional de Computação Científica

25 de junho de 2015



Laboratório  
Nacional de  
Computação  
Científica

- ▶ Etapas:
  - ▶ Marcar uma reunião até **10/07** para apresentar e discutir com Luiz (lgadelha@lncc.br) e Kary (karyann@lncc.br) a implementação proposta.
  - ▶ Implementação relacionada ao tema do curso:
    - ▶ Ferramentas de workflows e proveniência.
    - ▶ Aplicações (bioinformática, modelagem molecular, ecologia).
  - ▶ Relatório de seis páginas no formato: introdução, trabalhos relacionados, descrição da implementação, avaliação da implementação, conclusão.
  - ▶ Apresentação com duração de 20 minutos (distribuídas nos dias 08/09 e 10/09).
- ▶ A projeto deve ser executado em dupla.

- ▶ Coleta de eventos do ciclo de vida do workflow:
  - ▶ Mudanças e evolução da especificação.
  - ▶ Consumo e produção de dados por aplicações componentes executadas.
- ▶ Gerência de metadados relacionados ao domínio científico (semântica do experimento).
- ▶ Serviço de consulta a metadados e proveniência.
- ▶ Aplicações: reprodutibilidade, verificação, análise.

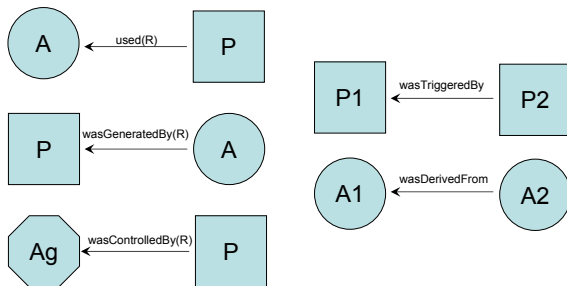
- ▶ Informações de **proveniência** descrevem o histórico de concepção e execução de um experimento.
- ▶ Proveniência **prospectiva** captura a especificação e sua evolução.
- ▶ Proveniência **retrospectiva** descreve de forma detalhada a geração de um conjunto de dados:
  - ▶ processos que o derivaram;
  - ▶ outros conjuntos de dados utilizados por estes processos;
  - ▶ agentes envolvidos na derivação.

S. B. Davidson and J. Freire, Provenance and scientific workflows: challenges and opportunities. *Proc. of the International Conference on Management of Data (SIGMOD 2008)*, pp. 1345–1350. ACM, 2008.

- ▶ Sistemas de proveniência podem ser classificados conforme:
  - ▶ aplicação;
  - ▶ conteúdo;
  - ▶ representação;
  - ▶ armazenamento;
  - ▶ disseminação.
- ▶ Não existe padrão definido para armazenamento e representação de proveniência: XML, BD, arquivos de log.
- ▶ Exemplos de sistemas com suporte a proveniência: Kepler, Swift, Taverna.

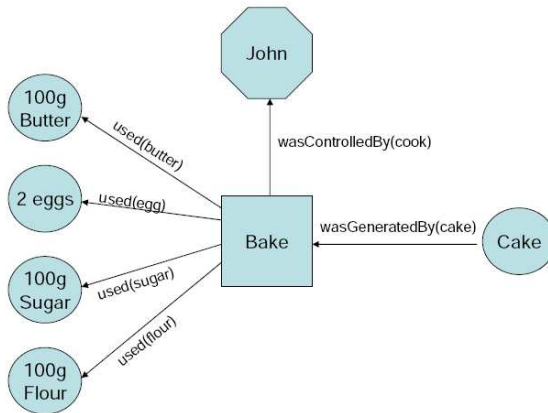
Y. L. Simmhan, B. Plale, D. Gannon. A survey of data provenance in e-science. *ACM SIGMOD Record*, 34(3):31-36, 2005.

# Open Provenance Model



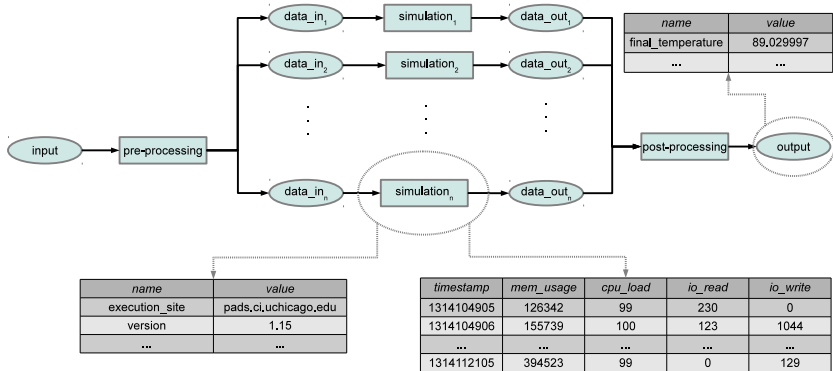
L. Moreau et al. The Open Provenance Model core specification (v1.1). *Future Generation Computer Systems*, 27(6):743–756, 2011.

# Open Provenance Model



L. Moreau et al. The Open Provenance Model core specification (v1.1). *Future Generation Computer Systems*, 27(6):743–756, 2011.

# Coleta de metadados e proveniência





- ▶ Aplicações de dados de proveniência:
  - ▶ re-execução inteligente de experimentos;
  - ▶ proteção à autoria;

L. Gadelha, M. Mattoso. Kairos: An Architecture for Securing Authorship and Temporal Information of Provenance Data in Grid-Enabled Workflow Management Systems. *IEEE Fourth International Conference on e-Science (e-Science 2008)*, pp. 597-602. 2008.

- ▶ avaliação da qualidade de dados;
- ▶ reproducibilidade de experimentos.

- ▶ Proveniência trata do histórico de concepção e execução de um experimento computacional.
- ▶ Proveniência retrospectiva vs. prospectiva.
- ▶ Dá suporte ao cientista na análise do experimento computacional.
- ▶ Permite reproduzir resultados de forma independente.



## Provenance Challenge

- ▶ Durante o *Third Provenance Challenge* foi apresentado um modelo de proveniência retrospectiva para MTC e uma implementação no Swift.
- ▶ Problemas detectados:
  - ▶ Ausência de informações do domínio científico dificultava a interpretação dos dados de proveniência.
  - ▶ Dificuldade de escrita de consultas no modelo relacional: junções e fecho transitivo.

- ▶ MTCProv é uma ferramenta de proveniência para workflows paralelos e distribuídos integrada ao Swift.
- ▶ Metodologia seguida:
  1. Levantamento de padrões de consulta.
  2. Modelagem de dados.
  3. Implementação de mecanismos de coleta.
  4. Implementação de interface de consulta.

- ▶ Além das informações estruturais do grafo de proveniência, um cientista quer saber:
  - ▶ Como avaliar o resultado de uma execução de workflow científico?
  - ▶ Qual o grau de precisão e confiança de uma simulação?
  - ▶ Qual foi custo computacional para se chegar ao resultado?
  - ▶ A computação pode ser reproduzida para verificação e confirmação de um resultado?
  - ▶ Qual a correlação entre performance científica e computacional?

L. Gadelha, M. Wilde, M. Mattoso, I. Foster. Exploring provenance in high performance scientific computing. *Proceedings of the First Annual Workshop on High Performance Computing Meets Databases (HPCDB 2011)*, pp. 17–20. ACM, 2011.

- ▶ Padrões:
  - ▶ Atributo de entidade (EA).
  - ▶ Relacionamento direto (R).
  - ▶ Relacionamento transitivo ( $R^*$ ).
  - ▶ Casamento de grafos (LGM).
  - ▶ Resumo de execução (RS).
    - ▶ Performance computacional (RRP).
    - ▶ Performance científica (RSP).
  - ▶ Comparação entre execuções (RCp).
  - ▶ Correlações entre execuções (RCr).

L. Gadelha, M. Mattoso, M. Wilde, I. Foster, Provenance Query Patterns for Many-Task Scientific Computations. *Proceedings of the 3rd USENIX Workshop on Theory and Applications of Provenance (TaPP'11)*, 2011.

# MTCProv: Padrões dos *Provenance Challenges*

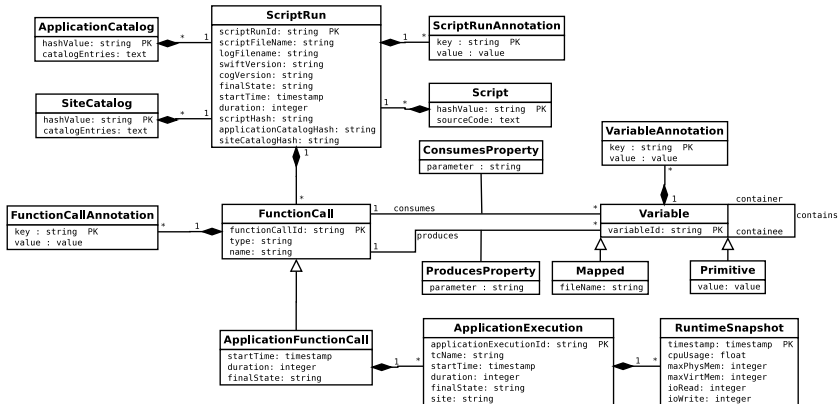
Padrão	PC1/PC2									PC3				PC3 (Consultas Opcionais)															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1	2	3	5	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	
EA	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
R	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x	x
R*	x	x	x			x	x			x	x	x	x		x		x				x	x			x	x	x	x	x
LGM							x								x														
RS	x	x	x							x	x	x	x	x		x	x							x	x	x	x	x	
RCp					x	x	x	x	x						x			x	x	x	x	x							x
RCr				x																									

## ► Objetivos:

1. Coletar informações sobre consumo e produção de artefatos e processos.
2. Coletar informações sobre hierarquia entre artefatos de dados.
3. Permitir o enriquecimento das informações de proveniência com anotações.
4. Coletar informações sobre versionamento de workflows científicos e aplicações componentes.
5. Coletar informações de tempo de execução das aplicações componentes.
6. Prover uma interface de consulta amigável e útil para as informações de proveniência.



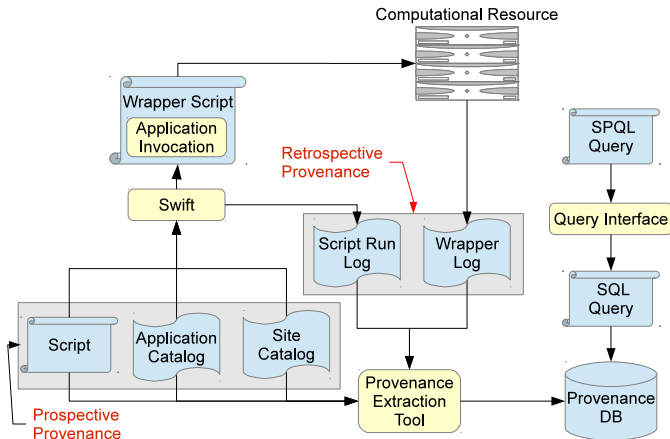
# MTCPProv: Modelagem de Dados



L. Gadelha, M. Wilde, M. Mattoso, and I. Foster. MTCPProv: a practical provenance query framework for many-task scientific computing. *Distributed and Parallel Databases*. Springer, 2012.

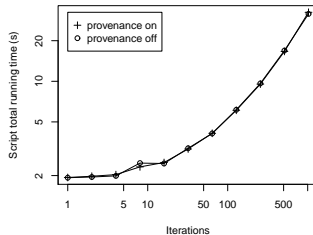
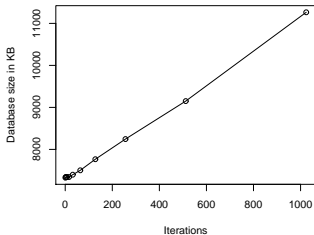
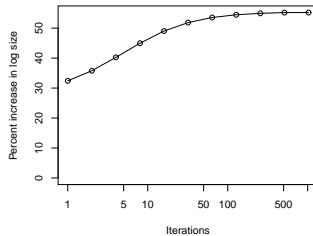
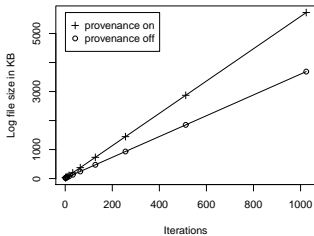
- ▶ Informações de proveniência são extraídas dos logs gerados Swift a cada execução de script.
- ▶ Armazenamento em banco de dados relacional:
  - ▶ As restrições de se utilizar um esquema de dados fixo podem ser reduzidas com o uso de anotações.
  - ▶ Fecho transitivo pode ser calculado facilmente com funções recursivas nativas a partir do SQL:1999.
- ▶ Modelos de dados baseados em grafos requerem travessia frequente para recuperação de atributos em consultas de agregação.

# MTCTProv: Captura e Armazenamento

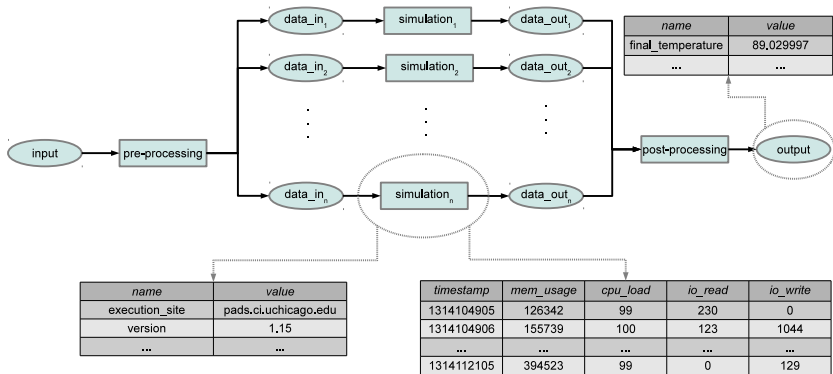


- ▶ Anotações podem ser coletadas por:
  - ▶ scripts *ad hoc* para um workflow científico,
  - ▶ scripts que iniciam a execução remota (*wrapper scripts*).
- ▶ Exemplos de anotações:
  - ▶ Parâmetros científicos não visíveis ao Swift.
  - ▶ Informações sobre segurança.

# MTCProv: Impacto da Captura e Armazenamento



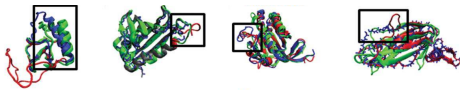
# MTCProv: Captura e Armazenamento de Anotações



L. Gadelha, M. Wilde, M. Mattoso, and I. Foster. Exploring provenance in high performance scientific computing. Proc. Workshop on High Performance Computing Meets Databases (HPCDC'11), pp. 17–20, 2011.

- ▶ Abstração de padrões de consultas comuns através de funções e procedimentos SQL.
- ▶ O padrão  $R^*$  é implementado com funções recursivas nativas do SQL no procedimento `ancestors`.
- ▶ Os padrões RCp e RCr são implementados pelo procedimento:
  - ▶ `compare_run((lista de parâmetros ou chaves de anotações))` retorna uma tabela com os valores das anotações e parâmetros por execução de script.
- ▶ Foi implementada uma interface de consultas em Java/ANTLR que calcula automaticamente cláusulas FROM e expressões para junções.

# Estudo de Caso: Open Protein Simulator

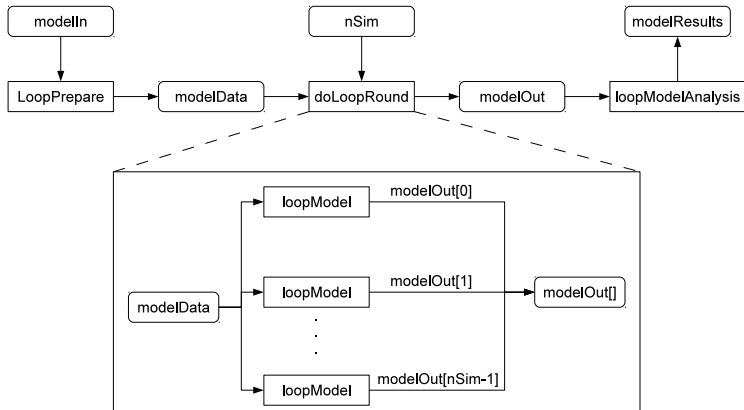


- ▶ Open Protein Simulator (OOPS) é uma aplicação para modelagem de estrutura de proteínas.
- ▶ Informação visível ao Swift:
  - ▶ Parâmetros científicos (p.ex. identificador da proteína).
  - ▶ Informações do tempo de execução (p.ex. duração de execuções).
- ▶ Um script coleta informações adicionais:
  - ▶ Parâmetros científicos não visíveis para o Swift.
  - ▶ Versões SVN das aplicações componentes e do script Swift.

A. Adhikari, J. Peng, M. Wilde, J. Xu, K. Freed, and T. Sosnick, Modeling large regions in proteins: Applications to loops, termini, and folding. *Protein Science* 21(1):107–121, 2012.



# Estudo de Caso: Open Protein Simulator



## Listar execuções entre duas datas:

```
select script_run
where  script_run.start_time between '2010-04-04' and '2010-08-08' and
       script_run.filename='psim.loops.swift';
```

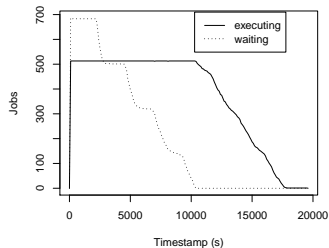
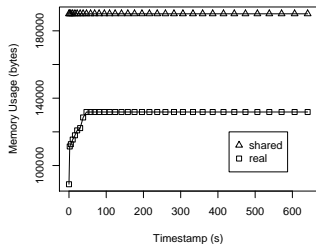
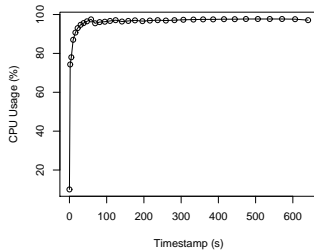
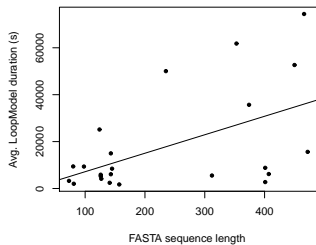
id	start_time	...
psim.loops-20100619-0339-b95ull17d	2010-06-19 03:39:15.18-05	...
psim.loops-20100618-0402-qhm9ugg4	2010-06-18 04:02:21.234-05	...
...	...	...

Correlação entre número de simulações e RMSD (performance científica):

```
SELECT run_id, r.value as nSim, t.value as rmsd
FROM   compare_run_by_param('proteinId') as r
      INNER JOIN
      compare_run_by_param('nSim') as s USING (run_id)
      INNER JOIN
      compare_run_by_annot('rmsd') as t USING (run_id)
WHERE  r.value='TR567' and run.id LIKE 'psim.loops%';
```

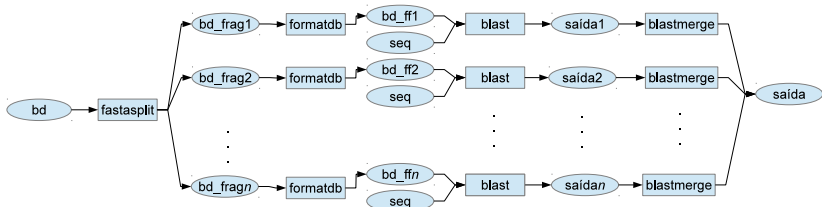
run_id	nSim	rmsd
psim.loops-20100604-2215-cdifsnb3	256	3.33123
psim.loops-20100613-0125-keyyyc35	512	0.76274
psim.loops-20100616-1512-h6q4g4ja	1024	0.68426
...		

# Estudo de Caso: Open Protein Simulator



# Estudo de Caso: BLAST Paralelo

Workflow científico para paralelização do BLAST através de particionamento do banco de dados de entrada:



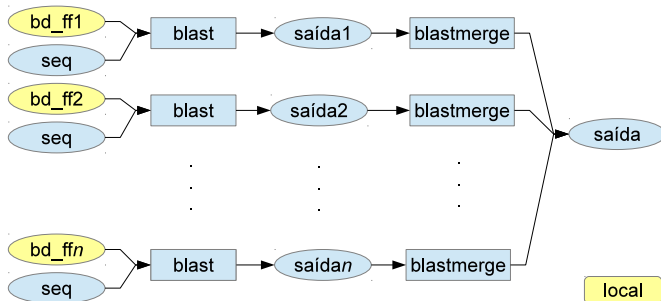
Análise do tempo de espera das aplicações componentes.

```
SELECT app_exec_id, timestamp, wait  
FROM runtime_info;
```

app_exec_id	timestamp	wait
blastall-3i191nsk	1339467548	100.0
blastall-3i191nsk	1339467550	81.7
blastall-3i191nsk	1339467552	50.8
blastall-3i191nsk	1339467554	45.9
blastall-3i191nsk	1339467555	38.4
blastall-3i191nsk	1339467556	31.8
blastall-3i191nsk	1339467558	30.0
blastall-3i191nsk	1339467560	34.7
blastall-3i191nsk	1339467561	33.1

⇒ concorrência de I/O.

# Estudo de Caso: BLAST Paralelo



## Análise do tempo de espera das aplicações componentes.

```
SELECT app_exec_id, timestamp, wait  
FROM runtime_info;
```

app_exec_id	timestamp	wait
blastall-leenrisk	1339924431	1.8
blastall-leenrisk	1339924437	2.2
blastall-leenrisk	1339924444	1.6
blastall-leenrisk	1339924453	1.2
blastall-leenrisk	1339924462	0.9
blastall-leenrisk	1339924472	0.7
blastall-leenrisk	1339924483	0.5
blastall-leenrisk	1339924495	0.4
blastall-leenrisk	1339924508	0.3



- ▶ ParaTrac coleta dados de performance de workflows, no entanto não coleta dados do domínio científico. Coleta dados de I/O do *FUSE* e de hierarquia de processos do PROCFS.

K. Dun et al. ParaTrac: a fine-grained profiler for data-intensive workflows. HPDC 2010, pp. 37–48.

- ▶ QLP pode ser utilizada para percorrer grafos de proveniência e dados hierárquicos mas não expressa alguns padrões frequentes.

M. Anand et al. Approaches for Exploring and Querying Scientific Workflow Provenance Graphs. IPAW 2010, pp. 17–26.

- ▶ SPROV utiliza assinaturas digitais para proteção de registros de proveniência mas não trata de questões temporais.

R. Hasan et al. Preventing history forgery with secure provenance. ACM Transactions on Storage 5(4):1–43, 2009.

- ▶ Com o MTCProv, está disponível:
  - ▶ Modelo de proveniência que representa aspectos importantes de workflows paralelos e distribuídos.
  - ▶ Coleta e armazenamento de proveniência com baixo impacto na escalabilidade do SGWC.
  - ▶ Interface de consulta que simplifica a escrita de consultas que seguem padrões frequentes.
  - ▶ Melhor apoio à fase de análise do experimento permitindo a interpretação dos resultados do ponto de vista científico atrelada ao custo computacional.
  - ▶ Identificação de controles de segurança essenciais à preservação da atribuição.