

Desempenho de *Workflows Multithreading* no Supercomputador SDumont em Experimentos de RNA-Seq

Lucas Cruz^{1,2}, Micaella Coelho², Luiz Gadelha², Kary Ocaña², Carla Osthoff²

¹Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca (CEFET/RJ)
Petrópolis – RJ – Brasil

²Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC)
Petrópolis – RJ – Brasil

{lucruz, micaella, lgadelha, karyann, osthoff}@lncc.br

Abstract. *This article presents a comparative analysis of the performance of the scientific workflow ParslRNA-Seq, on the Parsl and Bowtie parallelization parameters, in order to guarantee the rational use and efficient allocation of computational resources in the Santos Dumont Supercomputer.*

Resumo. *Este artigo apresenta uma análise comparativa de desempenho do workflow científico ParslRNA-Seq, sobre os parâmetros de paralelização do Parsl e do Bowtie, a fim de garantir o uso racional e alocação eficiente dos recursos computacionais no Supercomputador Santos Dumont.*

1. Introdução

A técnica de Sequenciamento de RNA (RNA-Seq) é utilizada nas análises de expressão de genes do transcrito, para o estudo de um conjunto de transcritos de uma célula em uma dada condição fisiológica ou de desenvolvimento, como o câncer. Na bioinformática, a modelagem de experimentos de RNA-Seq é um desafio devido à complexidade, manipulação de grandes volumes de dados e pelo custo computacional. *Workflows* científicos são abstrações que representam esses experimentos como um fluxo encadeado de atividades que são executadas por aplicações com diversas características, dentre as quais a de Computação de Alto Desempenho (CAD). Com o uso de sistemas de gerência ou linguagens de programação é possível modelar, gerenciar e analisar os *workflows*.

Este artigo é uma extensão de [Cruz et al. 2020] o qual apresenta a modelagem do *workflow* ParslRNA-Seq e uma análise exploratória sobre como o *workflow* utiliza os recursos computacionais. O presente trabalho apresenta análises acerca das execuções *multithreading*, sob uso de arquitetura CPU *multicore* Ivy Bridge, da atividade intitulada Bowtie, executada pelo *software* Bowtie2 e do Parsl, biblioteca Python utilizada para modelar e executar o *workflow*. Com execuções *multithreading* podem haver competições no uso dos recursos computacionais disponíveis, fazendo-se necessário estudar a melhor configuração de parâmetros *multithreading* do Bowtie e de paralelismo de tarefas do Parsl. O objetivo deste trabalho é prover uma análise comparativa de desempenho nas execuções *multithreading* do *workflow* ParslRNA-Seq em ambientes de CAD, mais especificamente no supercomputador Santos Dumont¹ (SDumont), para levar ao usuário a melhor configuração de parâmetros entre o paralelismo *multithreading* e de tarefas.

Agradecemos ao LNCC (MCTI, Brasil) por prover os recursos do supercomputador SDumont e pelo apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

¹Disponível em: <https://sdumont.lncc.br/>. Último acesso: 24/11/2020.

2. Trabalhos Relacionados

Em [Cruz et al. 2020] são realizados experimentos para avaliar a melhor configuração de parametrização *multithreading* do workflow ParslRNA-Seq, entre o Parsl e a aplicação Bowtie, para um conjunto de 6 arquivos de entrada. A conclusão do estudo é de que para arquivos de tamanhos similares aos utilizados e arquitetura similar à CPU Ivy Bridge Intel Xeon com 64 GB de memória RAM, a melhor configuração seria 12 no parâmetro de paralelização de tarefas do Parsl em conjunto com 24 *threads* da paralelização do Bowtie. O artigo também apresenta experimentos que demonstram que os diferentes tamanhos entre os arquivos de entrada causam um desbalanceamento de carga e uma baixa eficiência na utilização das CPUs. O presente trabalho realiza os mesmos experimentos, porém para arquivos de entrada com tamanhos maiores e utiliza a mesma metodologia para avaliar a melhor configuração para o paralelismo de tarefas do Parsl e de *threads* do Bowtie.

3. Metodologia

Para execução desse *workflow* foi utilizado um nó computacional do supercomputador SDumont composto por duas CPUs Ivy Bridge Intel Xeon E5-2695v2 (12c @2.4GHz) e 64 GB de memória RAM. Para a realização das análises de desempenho foram consideradas as médias dos tempos de três execuções, onde o número de *threads* variam de 1 a 24 e a quantidade de tarefas paralelas é equivalente a quantidade de arquivos de entrada dentro dos cenários descritos a seguir: O primeiro cenário, propõe uma execução paralela das tarefas apenas com o Parsl; O segundo cenário, faz execução paralela do Bowtie, fazendo com que a execução do Parsl seja serial, portanto, as demais tarefas componentes do *workflow* não são paralelizadas; No terceiro cenário, há uma paralelização de dois níveis, com o paralelismo de tarefas do Parsl e o *multithreadig* do Bowtie. Uma análise final é realizada, estendendo o melhor cenário observado, para um maior volume de dados.

4. Resultados

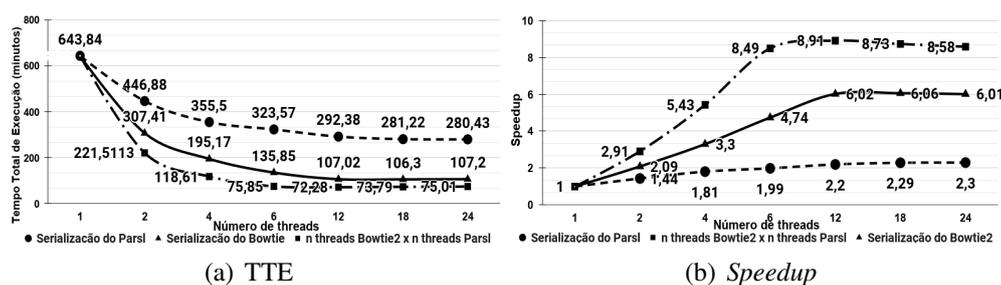


Figura 1. TTE e *Speedup* dos cenários de paralelização.

Os três cenários experimentais levantados na seção 3 são apresentados na Figura 1. 1(a) apresenta o Tempo Total de Execução (TTE) e 1(b) o *speedup*. As execuções foram realizadas para um conjunto de 6 arquivos de entrada, que possuem tamanhos entre 1.5 GB e 2.6 GB totalizando e gerando cerca de 11 GB e 54 GB de dados, respectivamente. A curva contínua traz a execução do primeiro cenário, indicando o melhor TTE de 106,3 minutos e *speedup* de 6,06 com 18 *threads*. A curva tracejada é referente ao segundo cenário, o melhor TTE é indicado em 24 *threads*, com 280,43 minutos e *speedup* de 2,3. O terceiro cenário é apresentado pela curva travessão-ponto com melhor TTE

de 72,28 e *speedup* de 8,91, indicado em 12 *threads*. Para os três cenários o ganho de desempenho do *workflow* demonstra uma tendência de estabilização a partir de 12 *threads*. Isso é devido ao número de dados de entrada fornecidos pois, como observado em [Cruz et al. 2020], o maior número de núcleos de CPUs utilizadas durante grande parte do tempo de execução do *workflow* será equivalente ao número de arquivos de entrada. Também é possível observar a partir dos resultados apresentados na Figura 1, que com a paralelização conjunta entre o Parsl e a aplicação Bowtie2, referente ao terceiro cenário, haverá maior eficiência no uso dos recursos computacionais disponíveis.

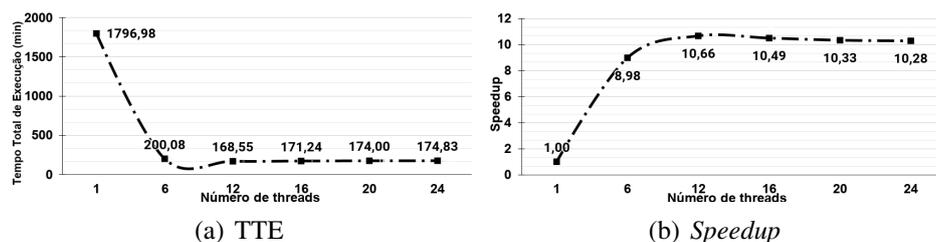


Figura 2. TTE e *Speedup* das execuções para um maior volume de dados.

Como destacado na seção 3 foi feita uma extensão para análise do terceiro cenário, o melhor dentre os três sugeridos, que é apresentada na Figura 2, TTE 2(a) e *speedup* 2(b). O volume total de dados de entrada utilizado foi quase o dobro do que foi utilizado nas análises da Figura 1. As execuções foram realizadas para um total de 8 arquivos de entrada que possuem tamanhos variando entre 1.8 GB e 4.1 GB totalizando e gerando, respectivamente, cerca de 23 GB e 135 GB. O melhor TTE foi de 168,55 minutos e o *speedup* de 10,66 indicados em 12 *threads*. A comparação de *speedup* entre o terceiro cenário da Figura 1 com o da Figura 2, que utiliza o dobro do volume de dados, indica que há uma maior distribuição de trabalho entre os núcleos devido ao número e volume de dados fornecidos, diminuindo o número de núcleos ociosos durante a execução.

5. Conclusão

As análises comparativas entre os cenários apresentados mostram que os melhores resultados são alcançados no terceiro cenário quando há o uso conjunto do recurso *multithreading* do Bowtie e do paralelismo de tarefas do Parsl, tendo a melhor configuração de parametrização apresentada quando o número de *threads* é igual a 12. No entanto, é necessário levar em consideração que com a alteração do número e volume de dados a melhor configuração de *threads* pode variar. Além disso, os resultados indicam que quanto maior for o volume e número dos arquivos de entrada, melhor será a eficiência no uso das CPUs. Como passos futuros serão realizadas análises sobre as execuções em múltiplos nós e o *workflow* ParslRNA-Seq, após otimizado, será disponibilizado para uso da comunidade científica através do portal de bioinformática Bioinfo-Portal².

Referências

Cruz, L., Coelho, M., Gadelha, L., Ocaña, K., and Osthoff, C. (2020). Avaliação de desempenho de um *workflow* científico para experimentos de rna-seq no supercomputador santos dumont. In *Workshop de Iniciação Científica do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho*. (Aceito em processo de publicação).

²Disponível em: <https://bioinfo.lncc.br/>. Último acesso: 24/11/2020.