

Análise do Comportamento das Operações de Entrada e Saída de um *Workflow* Científico de Alto Desempenho

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

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, osthoff, karyann}@lncc.br

Abstract. *We present an analysis of the behavior of the I/O operations of the scientific workflow version ParslRNA-Seq, coupled to HPC environments. The article discusses the choice of which workflow modeling modifications lead to improved performance and computational scalability, based on reduced expenses with I/O operations.*

Resumo. *Apresentamos uma análise do comportamento das operações de E/S da versão do workflow científico ParslRNA-Seq, acoplada a ambientes de CAD. O artigo traz discussões sobre a eleição de quais modificações na modelagem do workflow levam a melhora do desempenho e escalabilidade computacional, baseado em redução de gastos em operações de E/S.*

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 as quais são executadas por aplicações com diversas características, dentre elas 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 trabalho é uma extensão de [Cruz et al. 2021] o qual apresenta o *workflow* científico ParslRNA-Seq, com desempenho validado por análises comparativas computacionais e de inferência em análises de Expressão Diferencial de Genes (EDG), no qual foi desenvolvida uma versão paralela e distribuída em múltiplos nós, com ganhos de desempenho em até 70%. O presente trabalho apresenta análises do desempenho das operações de Entrada e Saída (E/S) deste mesmo *workflow*, em ambientes de CAD, com o objetivo de investigar a possibilidade de aumentar ainda mais o ganho de desempenho através da redução do tempo de execução com as operações de E/S.

2. Trabalhos Relacionados

[Cruz et al. 2020] apresenta análises de desempenho do ParslRNA-Seq_alfa executado no ambiente do supercomputador Santos Dumont (SDumont). As análises mostram que

o gerenciamento do Parsl em conjunto com o parâmetro *multithread* do Bowtie2, levam a reduções significativas no Tempo Total de Execução (TTE) do *workflow*, saindo de cerca de 3 dias para, aproximadamente, 1 hora e 10 minutos. [Cruz et al. 2021] apresenta uma versão otimizada do ParslRNA-Seq, onde são observados ganhos de desempenho de até 70% em relação a versão *alfa* dentro de ambientes de CAD. Essa melhora reduziu o TTE do *workflow* de, aproximadamente, 1 hora e 10 minutos para cerca de 24 minutos.

3. Metodologia

O ParslRNA-Seq é composto por seis atividades [Cruz et al. 2021]: A atividade 1, Bowtie, faz o mapeamento e comparação das leituras dos genomas, caractere a caractere, em arquivos extremamente extensos; A atividade 2, Sort, realiza uma ordenação nas leituras e converte o formato de saída do arquivo da atividade 1, para um formato binário comprimido; A atividade 3, Split.Picard, faz a manipulação para o particionamento das leituras, o que gera uma quantidade de n subarquivos. A atividade 4, HTSeq, faz a contagem dessas leituras processando cada subarquivo em um núcleo de CPU; A atividade 5, Merge_HTSeq, combina as subsoluções geradas; e, por fim, a atividade 6, DESeq, aplica estatísticas de EDG sobre as contagens realizadas. Das seis atividades, as atividades 1 e 2 fazem execução *multithreads* e a atividade 4, execução *multicore*.

Para a análise foi reproduzido o melhor cenário de execução observado nos trabalhos anteriores. O conjunto de dados de entrada utilizados contém ao todo seis arquivos, pertencentes a um experimento real de RNA-Seq, com tamanhos variando entre 1.8 GB e 3.0 GB. O ambiente computacional utilizado SDumont e foram alocados seis nós computacionais para execução do *workflow*, dos quais se compõem por duas CPUs Ivy Bridge Intel Xeon E5-2695v2 (12c @2.4GHz) e 64 GB de memória RAM. Para análise foi utilizado o perfilador Darshan, que tem como propósito investigar o comportamento de E/S de aplicações em ambientes de alto desempenho.

4. Resultados e Análise

Na presente seção, são discorridas análises das atividades que se apresentam de forma mais relevante em relação as operações de E/S: Bowtie e Sort. As análises levam em consideração o arquivo de menor e maior tamanho, 1.8 GB e 3.0 GB, respectivamente. A Figura 1 apresenta a média do custo das operações usando POSIX: de leitura (vermelho); de escrita (verde); e, outras operações que não envolvem E/S (rosa).

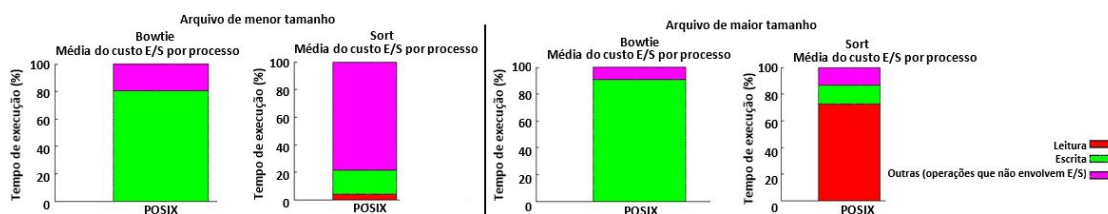


Figura 1. Atividades Bowtie e Sort: menor arquivo (esquerda) e maior (direita).

Análise das operações de E/S da atividade Bowtie. Para a atividade Bowtie as operações de escrita são as que mais se destacam. De modo que para o arquivo de maior tamanho, o TTE é cerca de 4 minutos e 23 segundos e cerca de 90% desse tempo é consumido em operações de escrita. Em média, a atividade escreveu 11 GB. Já para o

arquivo de menor tamanho, o TTE é de 2 minutos e 32 segundos e cerca de 80% desse tempo é gasto para operações de escrita. Em média, a atividade escreveu 6.0 GB. O que se constata é que a operação principal dessa atividade é a escrita, dado a variação de 10% na porcentagem do tempo gasto para tal entre o maior e menor arquivo. Além disso, o tamanho dos blocos que essa aplicação usa para escrita variam entre 1 KB e 10 KB.

Análise das operações de E/S da atividade Sort. Para a atividade Sort as operações de escrita já não estão tão em destaque. De modo que para o arquivo de maior tamanho, o TTE é cerca de 1 minuto e 31 segundos e cerca de 70% desse tempo é consumido em operações de leitura e cerca de 10% em operações de escrita. Em média são lidos 13 GB e escritos 1.1 GB. Já o arquivo de menor tamanho, o TTE é de 41 segundos, cerca de 5% é consumido em operações de leitura e em torno de 15% em operações de escrita. Em média são lidos 7.3 GB e escritos 657 MB. O que se constata é que a medida que o tamanho do arquivo aumenta, maior será a quantidade e mais tempo será gasto realizando operações de leitura. Isso pode ocorrer devido ao tamanho do arquivo e ao tamanho de blocos que a atividade do Sort utiliza para leitura (de 100 KB a 1 MB) e escrita (1 MB a 4 MB), ou seja, como o tamanho de blocos de leitura são menores, quanto maior for o tamanho do arquivo mais blocos de leitura serão requeridos e maior será a quantidade de operações de leitura a serem realizadas.

5. Conclusão

A partir das análises do comportamento das operações de E/S das atividades Bowtie e Sort do *workflow* ParsIRNA-Seq, é notório uma relação entre o tamanho do arquivo de entrada e a quantidade de operações de E/S. Em geral, a atividade Bowtie consome mais tempo em escrita, no entanto, essa escrita é feita em blocos de tamanho 1 KB a 10 KB, independentemente do tamanho do arquivo. O que pode influenciar no tempo de execução da atividade. Para a atividade Sort essa relação é bem mais perceptível, dado que há uma diferença de cerca de 65% no tempo gasto com operações de leitura entre maior e menor arquivo. E o tamanho dos blocos de leitura estão sempre dentro de uma faixa entre 100 KB e 1 MB, independentemente do tamanho do arquivo. Uma forma de reduzir o custo dessas operações de E/S é fazendo alteração no tamanho dos blocos, no entanto, é necessário realizar modificações dentro das próprias aplicações. Uma outra forma de reduzir gastos com E/S é realizando modificações na própria configuração de execução do *workflow*, para que as operações de E/S sejam feitas diretamente no SSD (*Solid State Drive*) do nó computacional em uso. Ambas abordagens fazem parte do próximos passos desse estudo.

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 *Anais Estendidos do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho*, pages 86–93, Porto Alegre, RS, Brasil. SBC.
- Cruz, L., Coelho, M., Terra, R., Carvalho, D., Gadelha, L., Osthoff, C., and Ocaña, K. (2021). Workflows científicos de rna-seq em ambientes distribuídos de alto desempenho: Otimização de desempenho e análises de dados de expressão diferencial de genes. In *Anais do XV Brazilian e-Science Workshop*, pages 57–64, Porto Alegre, RS, Brasil. SBC.