

Análise de um *Software* de Bioinformática em Arquitetura de Memória Compartilhada no Supercomputador Santos Dumont com o Intel VTune

Reiglan Soares^{1 2}, Albert Emidio^{1 2}, Lucas Cruz¹, Micaella Coelho¹, Kary Ocaña¹, Diego Carvalho³, Carla Osthoff¹

¹Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), RJ - Brasil

²Faculdade de Educação Tecnológica do Estado do Rio de Janeiro (FAETERJ-RJ), RJ - Brasil

³Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca (CEFET), RJ - Brasil

{reiglan,albert,lucruz,karyann,osthoff}@lncc.br,d.carvalho@ieee.org

Abstract. *The study evaluates the performance of the Bowtie2 software, widely used in genetic alignment tasks and one of the most costly steps in the ParslRNA-Seq workflow. The analysis was conducted on Ivy Bridge and Ivy Bridge (MESCA2) nodes, both with shared memory architecture. The executions were managed by the Parsl library and monitored by the Intel VTune profiler to observe the distribution and efficiency of the task on both nodes. The results showed that Ivy Bridge provided better task distribution among the cores, while Ivy Bridge (MESCA2) presented limitations in the efficient use of cores, resulting in inferior performance due to underutilization of the available resources.*

Resumo. *O estudo avalia o desempenho do software Bowtie2, amplamente utilizado em tarefas de alinhamento genético e é uma das etapas mais custosas no workflow ParslRNA-Seq. A análise foi realizada nos nós Ivy Bridge e Ivy Bridge (MESCA2), ambos com arquitetura de memória compartilhada. As execuções foram gerenciadas pela biblioteca Parsl e monitoradas pelo perfilador Intel VTune para observar a distribuição e eficiência da tarefa em ambos os nós. Os resultados mostraram que o Ivy Bridge proporcionou uma melhor distribuição de tarefas entre os núcleos, enquanto o Ivy Bridge (MESCA2) apresentou limitações no uso eficiente dos núcleos, resultando em desempenho inferior devido à subutilização dos recursos disponíveis.*

1. Introdução

Os experimentos de bioinformática são complexos e exigem alto custo computacional, necessitando de tecnologias especializadas como *workflows* científicos, sistemas de gerência, aprendizado de máquina e computação de alto desempenho (CAD). *Workflows* científicos são abstrações que representam esses experimentos como um fluxo encadeado de atividades, as quais são executadas por aplicações científicas com diversas características. Com o uso de sistemas de gerenciamento ou linguagens de programação, é possível modelar, gerenciar e analisar os *workflows* [Cruz et al. 2020].

O *workflow* de transcriptômica ParslRNA-Seq para análise de expressão diferencial de genes (EDG) foi utilizado como estudo de caso. O ParslRNA-Seq foi modelado e gerenciado com a biblioteca Parsl, desenvolvida em Python, para facilitar a modelagem, integração e automatização do *workflow* em ambientes de CAD. O *workflow* é composto por um conjunto de seis atividades: Bowtie mapeia as leituras; Sort ordena as leituras; Split divide arquivos de entrada; HTSeq conta as leituras geradas no Split; Merge indexa as contagens; e DESeq realiza a análise estatística de EDGs. Este trabalho foca na análise computacional do Bowtie2, que é executado como uma atividade, e é considerado a mais representativa e computacionalmente intensiva no *workflow* [Cruz et al. 2021].

Bowtie2 é um *software* eficiente usado para alinhar leituras de sequenciamento bem longas, como o genoma humano. Ele utiliza uma técnica chamada Índice FM, que ajuda a manter o uso de memória baixo e suporta a execução em múltiplos processadores, para acelerar o processo de alinhamento de milhões de pequenas sequências de DNA (leituras) ao longo de um genoma de referência. Cada leitura é comparada com diferentes regiões do genoma, o que aumenta o número de transações conforme cresce o tamanho dos dados. A execução do Bowtie foi analisada com o Intel VTune, um *software* de análise de desempenho que detalha o uso dos recursos computacionais da CPU e memória, permitindo identificar gargalos de desempenho e melhorar a eficiência do *workflow*. O objetivo do presente trabalho é analisar o uso das CPUs na execução da tarefa Bowtie2 em diferentes arquiteturas do Supercomputador Santos Dumont (SDumont).

2. Metodologia

Os dados deste estudo são de um experimento real de RNA-Seq, extraídos do repositório Gene Expression Omnibus (GEO), com o ID GSE97763. Foram divididos em grupo de controle (SRR5445794, SRR5445795, SRR5445796) e grupo de condições das vias metabólicas Wnt (SRR5445797, SRR5445798, SRR5445799), utilizando o organismo *Mus musculus*. As leituras foram alinhadas ao genoma de referência do *Mus musculus* (UCSC versão mm9) usando o Bowtie2. O conjunto de dados contém arquivos variando entre 1,8GB e 3,0GB, totalizando 13GB. O perfilador Intel VTune foi executado juntamente com o software Parsl na atividade Bowtie2.

As execuções foram realizadas em média 3 vezes para cada nó:

Nó Base: Composto por 2 CPUs Intel Xeon E5-2695v2 (12 núcleos a 2.4GHz cada), 24 núcleos de 64 GB de memória RAM, utiliza uma arquitetura de memória compartilhada que possui sistema de *clusters*, suportando tarefas segmentáveis e distribuídas entre nós através de rede Infiniband EDR de 100 Gb/s, sendo econômico e escalável horizontalmente.

Nó MESCA2: Composto por 16 CPUs Intel Xeon Ivy Bridge (240 núcleos no total) e 6 TB de memória RAM, utiliza uma arquitetura de memória compartilhada onde todos os 240 núcleos têm acesso à mesma memória RAM. Com esse modelo, a comunicação é direta e rápida entre os núcleos.

3. Resultados e Análises

3.1 Análise Computacional do *Workflow* com o Perfilador VTune

A Figura 1 apresenta um histograma do Intel VTune mostrando a utilização dos núcleos dos dois processadores do nó computacional Intel Xeon Ivy Bridge durante a execução das 6 atividades do *workflow* ParslRNA-Seq. Observe-se que os 24 núcleos mantêm uma alta taxa de utilização ao longo de todas as atividades. Como apenas as atividades Bowtie2 e Sort implementam multithreading e, portanto, utilizam todos os 24 núcleos, enquanto as demais executam apenas 6 *tasks*, conclui-se que o uso intensivo dos 24 núcleos durante grande parte do tempo se deve à aplicação Bowtie, que domina o tempo de execução do *workflow*, conforme ilustrado na Figura 1.

Para comprovar essa hipótese, apresentamos as Figuras 2 e 3 que evidenciam que a atividade Bowtie2 mantém o uso máximo dos núcleos durante grande parte do seu tempo de execução.

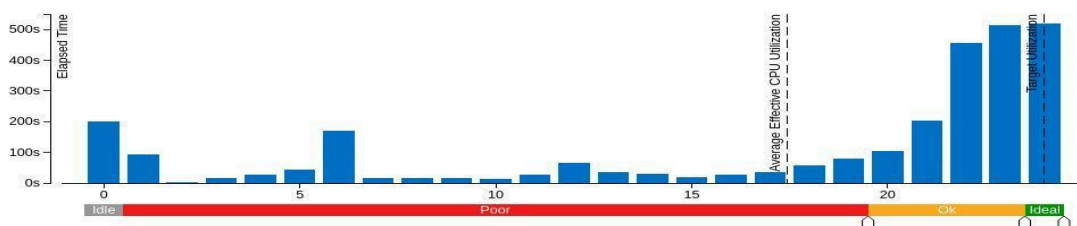


Figura 1. Uso da CPU no Ivy Bridge 24 cores

3.2 Análise Computacional da Atividade Bowtie2 com o Perfilador VTune

Nas execuções realizadas com o Ivy Bridge (Figura 2) e o Ivy Bridge MESCA2 (Figura 3), observou-se uma alta utilização do número máximo de núcleos ao longo da execução da atividade em ambos os histogramas. A Figura 2 indica uma média de uso de aproximadamente 20 *threads*, enquanto a Figura 3 registra uma média de 200 *threads*, evidenciando que a atividade Bowtie2 consumiu uma grande quantidade de recursos disponíveis.

O gráfico da Figura 2 mostra que o Ivy Bridge distribuiu o trabalho entre as 24 *cores* de forma eficiente, mantendo alta performance sem ociosidade, com uma média de 20 *cores* em uso. Já o gráfico da Figura 3 indica uma distribuição de trabalho um pouco menos eficiente no MESCA2, com cerca de 180 *cores* em uso intenso dos seus 240, embora 25% deles tenham sido pouco utilizados, possivelmente devido à grande capacidade computacional do nó, que excede as demandas da atividade. Ambas as arquiteturas apresentam uma boa média de uso de CPUs, aproveitando a maioria dos *threads* disponíveis e otimizando o tempo de execução.

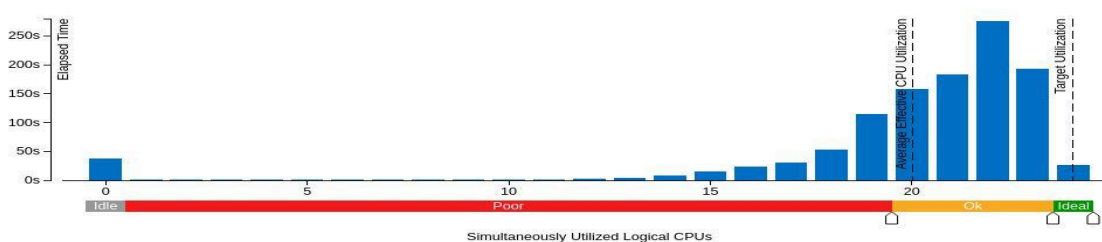


Figura 2. Uso da CPU no Ivy Bridge 24 *cores*

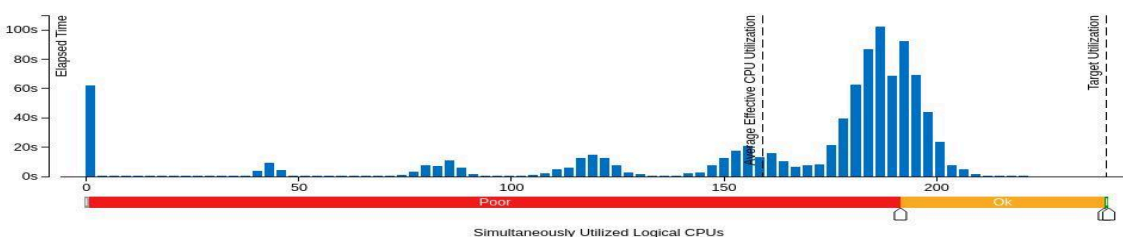


Figura 3. Uso da CPU no Ivy Bridge (MESCA2) com 240 *cores*

4. Conclusão

Neste trabalho, a análise realizada com o Intel VTune para avaliar a distribuição de trabalho entre os núcleos dos nós Ivy Bridge e Ivy Bridge (MESCA2) permitiu observar a eficiência na execução da tarefa Bowtie2, destacando sua alta capacidade de utilização dos recursos disponíveis. Embora ambas as arquiteturas apresentem comportamento semelhante, com aumento progressivo na utilização dos núcleos e maior eficiência ao longo do tempo de execução, o Ivy Bridge apresentou 17,2% mais eficiência que o MESCA2, cuja subutilização de parte dos *cores* comprometeu o seu desempenho. Esses resultados indicam que configurações mais avançadas não garantem necessariamente um desempenho superior e auxiliam na compreensão do comportamento de cada nó para melhorar o tempo de processamento da tarefa.

5. Referências

- [1] Cruz, L., Coelho, M., Gadelha, L., Ocana, K., e Osthoff, C. (2020). Avaliação de desempenho de um *workflow* científico para experimentos de RNA-Seq no supercomputador SDumont. In Anais Estendidos do XXI Simpósio em SCAD, páginas 86–93, Porto Alegre, RS, Brasil. SBC.
- [2] Cruz et al. (2021) exploram a otimização de fluxos de trabalho de RNA-Seq em ambiente distribuído de alto desempenho, focando no desempenho e na análise de expressão diferencial de genes. Publicado nos Anais do XV Workshop Brasileiro de e-Ciência, Porto Alegre, RS, Brasil. SBC.