# Uma Ferramenta de Software para a Predição de Desempenho de Workflows Científicos\*

Lucas Magno†, Kelly Rosa Braghetto‡

Universidade de São Paulo / † Instituto de Física, ‡ Instituto de Matemática e Estatística lucas.magno@usp.br | kellyrb@ime.usp.br

## Resumo

Experimentos científicos frequentemente lidam com grandes quantidades de dados e processos com altos custos computacionais, exigindo a análise de seus desempenhos através de métodos que não envolvam suas execuções. Um destes métodos é a representação dos experimentos em modelos de *workflow* por meio de linguagens formais, que permitem a extração de predições quantitativas de desempenho. Entretanto, o uso dessas linguagens requer familiaridade com formalismos complexos, restringindo-o às áreas da ciência com maior domínio em computação.

Neste projeto, portanto, foi desenvolvida uma ferramenta em *Python* capaz de, a partir da descrição de um *workflow* em uma linguagem simples e intuitiva, gerar suas predições de desempenho através da álgebra de processos estocástica *PEPA*, permitindo a otimização de experimentos científicos por usuários não-especialistas.

### **Abstract**

<sup>\*</sup>Este trabalho foi financiado por uma bolsa de iniciação científica CNPq/PIBIC (processo: 155544/2013-6).

# Introdução

Inicialmente desenvolvidos para automatizar processos industriais e empresariais, os *workflows* se popularizaram e passaram a ser usados na modelagem e automatização de experimentos científicos em diversas áreas da ciência. Um *workflow científico* é a descrição completa ou parcial de um experimento científico em termo de suas atividades, controles de fluxo e dependência de dados [6].

Por ser comum em workflows científicos a manipulação de enormes quantidades de dados e a presença de processos que consomem muitos recursos computacionais, ferramentas que forneçam predições de desempenho desse tipo de sistema fazem-se necessárias. As predições auxiliam na escolha dos recursos computacionais apropriados para a execução e na identificação de possíveis problemas na modelagem dos workflows, possibilitando assim execuções mais eficientes.

Há várias maneiras de se representar um *workflow científico*, como, por exemplo, por meio de *grafos direcionados*, *UML* (Unified Modeling Language), *redes de Petri* e *álgebras de processos* [7]. Estes mecanismos de representação são usados para criar modelos que especificam a ordem de execução das atividades pertencentes aos *workflows*. Linguagens formais como as redes de Petri e as álgebras de processos, vão além de uma simples representação, pois permitem também que se verifique propriedades qualitativas e quantitativas dos modelos de *workflow* nelas representados. Em particular, extensões estocásticas dessas linguagens frequentemente são usadas para a criação de modelos preditivos do desempenho de sistemas computacionais.

Apesar dos inúmeros benefícios que esses formalismos podem trazer à modelagem de workflows, o seu uso na prática impõe algumas dificuldades. Ele exige que o usuário tenha familiaridade com linguagens e modelos estocásticos (de compreensão pouco intuitiva) e com seus programas de simulação ou análise numérica. No entanto, os *workflows* científicos são criados e manipulados por cientistas das mais diversas áreas da ciência e que, geralmente, não são especialistas em computação.

# **Objetivos**

Este trabalho aborda o problema da predição de desempenho de workflows científicos, propondo uma ferramenta de software que automatiza a geração de predições baseadas em modelos estocásticos. O objetivo da ferramenta é esconder do usuário final a complexidade associada à criação e análise desse tipo de modelo.

A ferramenta – chamada de wkf2pepa – gera automaticamente modelos estocásticos a partir de modelos de workflows descritos em uma linguagem bastante simples e de compreensão intuitiva, fácil de ser usada por cientistas de qualquer domínio. A ferramenta obtém a solução numérica dos modelos estocásticos e então extrai índices de desempenho relacionados aos modelos de workflows fornecidos como entrada.

## **Materiais e Métodos**

Os modelos de *workflows* usados como entrada para a ferramenta wkf2pepa são descritos textualmente na forma de um grafo dirigido – uma representação simples e que pode ser usada com facilidade por usuários não especialistas. Para a criação dos modelos estocásticos, optou-se pelo uso da linguagem *PEPA – Performance Evaluation Process Algebra*, uma álgebra de processos estocástica bem estabelecida e que conta com várias ferramentas de apoio.

Neste trabalho, considera-se que *workflows* sejam compostos por *atividades*, que representam atividades reais de um experimento, e estruturas para descrever o fluxo de controle, como *sequência*, *paralelismo*, *escolha* e *sincronização*, definidas por meio dos operadores *AND* (paralelismo/sincronização), *XOR* (escolha exclusiva/junção) e *OR* (escolha múltipla/junção). Para que possua um modelo correspondente em *PEPA*, um modelo de *workflow* precisa ser bem estruturado e não possuir ambiguidades semânticas. Por essa razão, neste trabalho são considerados apenas modelos de *workflow* que apresentam somente um ponto de entrada e um ponto de saída, têm sua estrutura em forma de "blocos" e não apresentam ciclos, ou laços.

A wkf2pepa foi implementada na linguagem *Python*. Ela usa a bibllioteca *pyPEPA*[5], uma implementação recente de um solucionador para *PEPA* em *Python*, para calcular as probabilidades no regime estacionário de cada um dos estados possíveis do *workflow* descrito no modelo em *PEPA*. A partir dessas probabilidades, a *pyPEPA* consegue fornecer o rendimento (*throughput*) das atividades do *workflow* e também a taxa de utilização de seus componentes.

Além do modelo em *PEPA* e sua solução, a wkf2pepa também gera uma representação gráfica do modelo de *workflow*, que permite que o usuário possa verificá-lo mais facilmente.

O funcionamento completo da ferramenta wkf2pepa pode ser descrito pelos seguintes passos:

- 1. Recebe como entrada uma descrição textual (modelo) de um *workflow* que segue uma sintaxe simples, criada com base na linguagem *DOT* [2];
- 2. Por meio de analisadores léxico e sintático gerados com a biblioteca *PLY* (*Python Lex-Yacc*) [4], lê o modelo de workflow e gera uma representação em memória dele. Essa representação, baseada em grafos, é feita através de classes criadas na ferramenta para a manipulação de nós, arestas e *workflows*.
- 3. Gera uma descrição do *workflow* de entrada em linguagem *DOT* e sua representação gráfica (visualização) através da biblioteca *Graphviz* [3].
- 4. Gera um modelo analítico (estocástico) do workflow na linguagem PEPA.
- 5. Gera a solução numérica do modelo analítico e extrai os índices de desempenho com a pyPEPA.

### Resultados

O código fonte da wkf2pepa, suas dependências, informações sobre o seu uso, exemplos de workflows de entrada (e seus respectivos modelos em *PEPA*) podem ser vistos na página do projeto [1].

Ao processar um *workflow*, a ferramenta cria arquivos de saída contendo a descrição do *workflow* em *DOT*, sua representação gráfica, sua descrição em *PEPA* e os índices de desempenho dela extraídos. Um exemplo de descrição de workflow que pode ser usada como entrada para a ferramenta e parte dos resultados de saída gerados para ela são mostrados na Figura 1. Outros exemplos de workflows com estruturas mais complexas e seus respectivos resultados encontram-se na página do projeto [1].

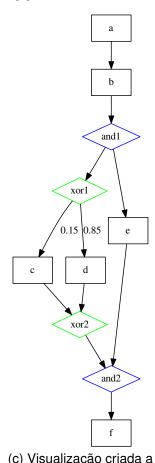
```
digraph {
1
2
                       -> b:
                       -> and1;
        b
        and1 [and]
                      -> e, xor1;
4
                      \rightarrow [0.15] c, [0.85] d;
5
        xor1 [xor]
6
        e [0.5]
                       -> and2;
                       -> xor2:
7
        С
8
        d
                       -> xor2;
        xor2
                       -> and2;
9
                      −> f;
        and2
10
   }
```

(a) Descrição do workflow de entrada.

(b) Modelo em PEPA gerado.

```
r_a = 1.0; r_b = 1.0; r_e = 0.5;
r_c = 1.0; r_d = 1.0; r_f = 1.0;
   r\_AND = 100.0; r\_XOR = 100.0; r\_OR = 100.0;
   prob xor1 c = 0.15; prob xor1 d = 0.85;
6
   r_xor1_c = prob_xor1_c * r_XOR;
8
   r\_xor1\_d = prob\_xor1\_d * r\_XOR;
   P = (a, r_a) . (b, r_b) . (and 1, r_AND) . (and 2, r_AND) . (f, r_f) . P;
12
   13
14
15
17
18
   P <and1, and2> (P and1 e <and1, and2> P and1 xor1)
```

Figura 1: Exemplo de uma execução da wkf2pepa.



partir da saída em DOT

## Conclusões

Este trabalho apresenta a ferramenta de software wkf2pepa, que converte de forma automática modelos de workflow em modelos estocásticos e, a partir destes últimos, extrai predições do desempenho dos workflows. A predição do desempenho de workflows é importante porque auxilia a identificação de problemas em sua modelagem e o provisionamento dos recursos necessários para a execução eficiente desses sistemas.

Os modelos de *workflow* usados como entrada para a wkf2pepa são definidos por meio de uma notação textual simples e intuitiva, que permite descrever as estruturas de fluxos de atividades mais comumente encontradas nos experimentos científicos. Assim, a wkf2pepa possibilita que usuários obtenham predições sobre o desempenho de workflows de forma prática, sem a necessidade de conhecer detalhes sobre modelagem estocástica e análise numérica.

A wkf2pepa gera modelos estocásticos na álgebra de processos *PEPA*. A ferramenta usa a biblioteca *pyPEPA* para obter a solução numérica dos modelos estocásticos e índices de desempenho tais como a taxa de utilização dos componentes do modelo e o rendimento de cada atividade e do workflow como um todo.

Como trabalhos futuros, pretende-se estender a wkf2pepa para que ela lide com modelos de workflows que incluam uma descrição dos recursos disponíveis para a execução. Com isso, os modelos estocásticos gerados e os índices de desempenho extraídos a partir deles fornecerão uma boa aproximação do desempenho real esperado para os workflows.

## Referências

- [1] Código fonte da ferramenta de software desenvolvida, exemplos de workflow de entrada e seus respectivos modelos em PEPA. www.ime.usp.br/~kellyrb/ic/#lucas.
- [2] The DOT Language | Graphviz Graph Visualization Software. http://www.graphviz.org/content/dot-language.
- [3] Graphviz | Graphviz Graph Visualization Software. http://www.graphviz.org/.
- [4] PLY (Python Lex-Yacc). http://www.dabeaz.com/ply/.
- [5] pypepa Python toolset for PEPA. https://github.com/tdi/pyPEPA.
- [6] Gadelha, L. M. R.: *Gerência de Proveniência em Workflows Científicos Paralelos e Distribuídos*. Tese de Doutoramento, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2012.
- [7] Ogasawara, E. S.: *Uma Abordagem Algébrica para Workflows Científicos com Dados em Larga Escala.* Tese de Doutoramento, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2011.