



UM SISTEMA DE INFORMAÇÃO PARA GERÊNCIA DE PROJETOS CIENTÍFICOS BASEADOS EM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

Leonardo Sousa Lima Ramos
e-mail: leosramos@gmail.com

Banca examinadora:

- Daniel de Oliveira – Orientador
- Leonardo Murta
- Kary Ocaña

SUMÁRIO



1. Introdução / Motivação
2. Referencial Teórico
3. O SciManager – Arquitetura e Funcionalidades
4. Avaliação Experimental
5. Trabalhos Relacionados
6. Conclusão

INTRODUÇÃO

MOTIVAÇÃO

- Aumento da utilização de simulações computacionais para apoiar experimentos em diversos domínios da ciência
- Gerência extremamente complexa

INTRODUÇÃO

MOTIVAÇÃO

- ❑ Projetos podem estar associados a vários experimentos e Workflows
- ❑ Experimentos requerem execuções de diversas simulações computacionais
- ❑ Tarefas dos projetos devem estar associadas às execuções computacionais
- ❑ Simulações podem demorar dias ou semanas
- ❑ Equipes podem estar dispersas geograficamente

INTRODUÇÃO

MOTIVAÇÃO

- Por que não utilizar técnicas de gerência de software para gerenciar e controlar os projetos?
- Necessidade de uma ferramenta que gerencie o Projeto Científico como um todo, não só em um experimento ou Workflow
- Desenvolvimento do SciManager
- O SciManager é capaz de gerenciar o Projeto Científico e os Workflows de maneira inter-relacionada

REFERENCIAL TEÓRICO

PROJETOS, EXPERIMENTOS E WORKFLOWS CIENTÍFICOS

- Afinal, o que são Projetos Científicos, Experimentos Científicos e Workflows Científicos?

REFERENCIAL TEÓRICO

PROJETOS CIENTÍFICOS

- É a unidade de trabalho de mais alto nível e tem como objetivo principal funcionar como um roteiro de trabalho ou instrumento de planejamento, além de ser o elemento direcionador da pesquisa
- Conta com grupos de pessoas para as quais as tarefas e responsabilidades relativas ao projeto serão atribuídas
- Pode ser composto por um ou mais experimentos científicos

REFERENCIAL TEÓRICO

EXPERIMENTOS CIENTÍFICOS

- Definição: “um teste executado sob condições controladas, que é realizado para demonstrar uma verdade conhecida, examinar a validade de uma hipótese, ou determinar a eficácia de algo previamente não explorado”. *Oxford Dictionary of English*
- Geralmente representam um encadeamento e execução de diferentes programas e podem ser modelados em um Workflow Científico

REFERENCIAL TEÓRICO

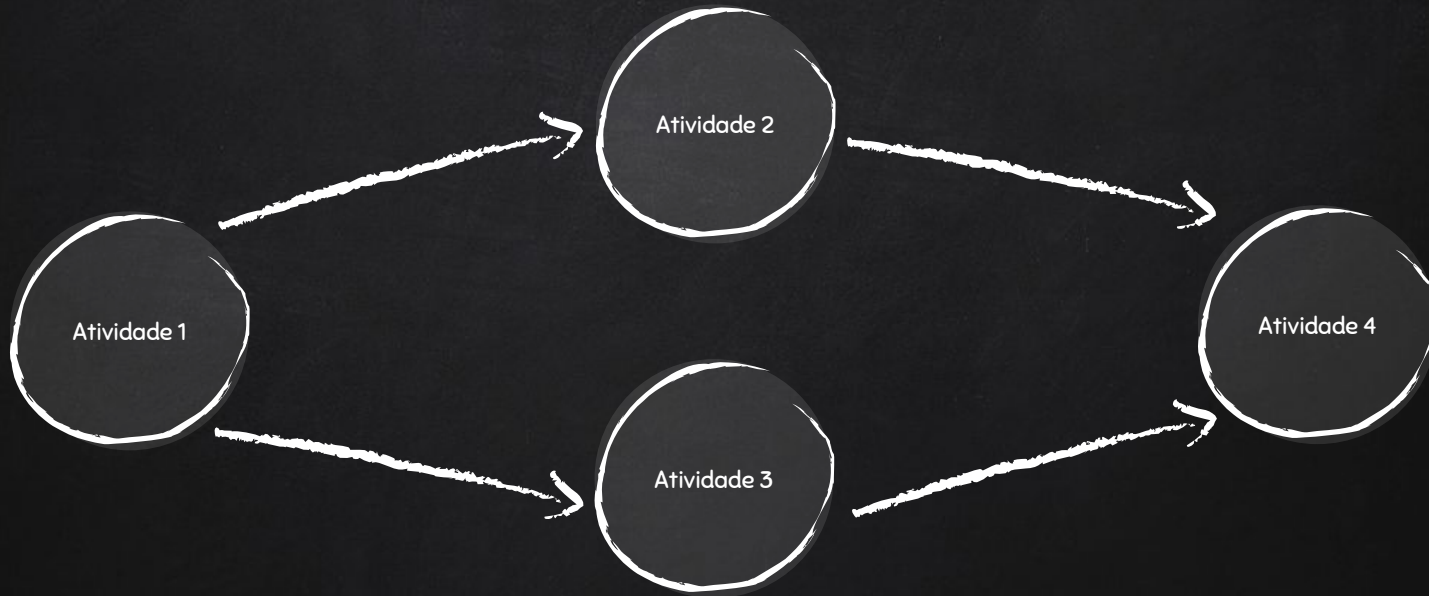
WORKFLOWS CIENTÍFICOS

- É uma abstração que modela o encadeamento de atividades (invocações de programas) e dados sendo executados por Sistemas de Gerência de Workflow Científicos (SGWfC)

REFERENCIAL TEÓRICO

WORKFLOWS CIENTÍFICOS

- Podemos representá-lo como um grafo direcionado e acíclico



REFERENCIAL TEÓRICO

SGWfC

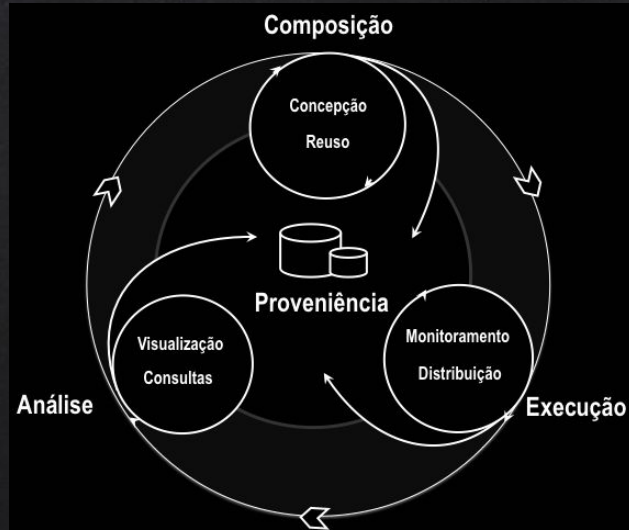


- Sistemas capazes de gerenciar, executar e coletar dados de proveniência das atividades de um Workflow
- Os dados de proveniência descrevem o histórico da execução de um experimento e são fundamentais para a reprodução e/ou a análise dos resultados
- Ex.: SciCummulus, Kepler, myGrid, etc...

REFERENCIAL TEÓRICO

CICLO DE VIDA DO EXPERIMENTO CIENTÍFICO

- Consiste basicamente em múltiplas interações, a serem realizadas por cientistas, durante o curso de um experimento

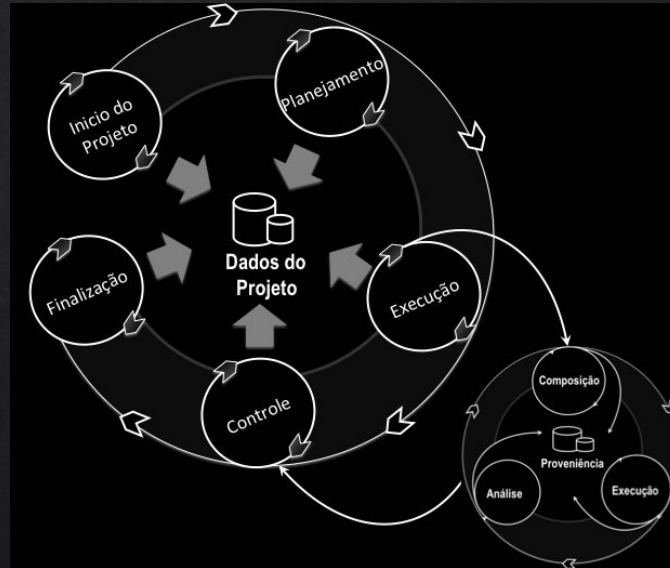


Ciclo simplificado

REFERENCIAL TEÓRICO

CICLO DE VIDA DO PROJETO CIENTÍFICO

- Consiste em um conjunto de fases que são executadas pelos membros do projeto
- Baseado em técnicas/metodologias de gerência de projetos



REFERENCIAL TEÓRICO

CICLO DE VIDA DO PROJETO CIENTÍFICO

- Início do Projeto:
 - Discutidos objetivos, metodologias e membros
 - Produzido um documento que representa um termo de abertura do projeto com verbas, expectativas, equipe, etc.
- Planejamento do Projeto:
 - Discutidos os requisitos de alto nível levantados na fase inicial a fim de se criar requisitos mais específicos para guiar a criação das tarefas
- Execução do Projeto:
 - Execução das tarefas especificadas

REFERENCIAL TEÓRICO

CICLO DE VIDA DO PROJETO CIENTÍFICO

- Controle e Monitoramento:
 - As tarefas executadas na fase de execução são verificadas e auditadas pelos gerentes do projeto
- Finalização:
 - É obtido um documento final que apresenta tanto os resultados gerados como algumas estatísticas do projeto
- Entre uma fase e outra do projeto são realizadas reuniões entre seus membros, com o objetivo de verificar o andamento e/ou conclusão do mesmo



O SCIMANAGER

ARQUITETURA




- ❑ Sistema Web desenvolvido em Java (1.7)
- ❑ Desenvolvimento em camadas utilizando padrão de arquitetura MVC (Model-View-Controller)
- ❑ Utilização do Arcabouço Spring Boot
 - Convention Over Configuration
- ❑ Arcabouço para teals e templates: Thymeleaf
 - Conceito de modelos naturais
- ❑ Segurança e autenticação: Spring Security



O SCIMANAGER ARQUITETURA



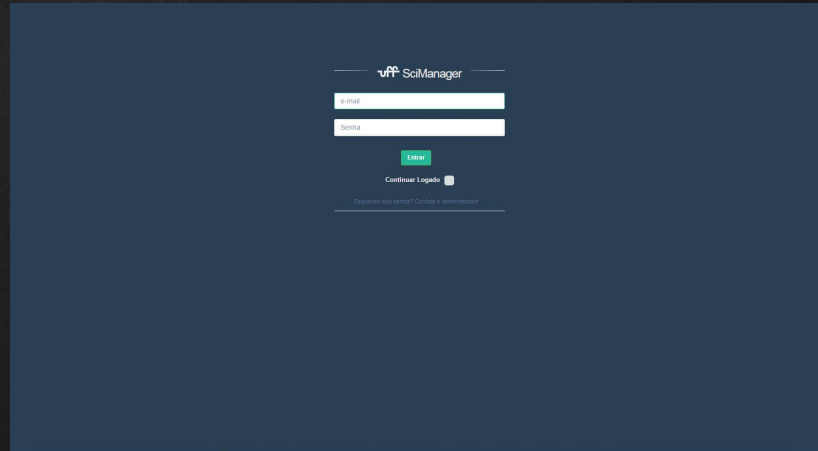
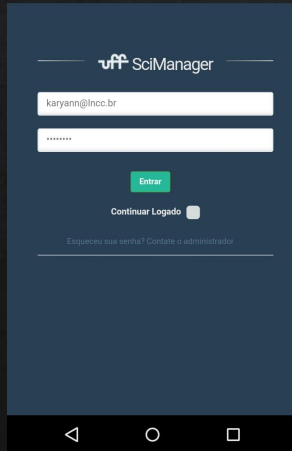
- ❑ Servidor: Apache Tomcat 7, que foi instalado e configurado em um servidor no ambiente de nuvem Amazon EC2 
- ❑ Banco de Dados: PostgreSQL
- ❑ Desenvolvido utilizando o Eclipse Mars no Sistema Operacional Ubuntu 15.04
- ❑ Pode ser utilizado em diversos navegadores (Chrome / Firefox / Opera / Safari / Edge / IE acima do IE10), inclusive navegadores Mobile



O SciManager ARQUITETURA



- Layout desenvolvido de maneira responsiva
 - Se adapta a qualquer tamanho de tela (viewport)
 - Tamanho dos componentes baseado em porcentagens
 - Arcabouço Twitter Bootstrap

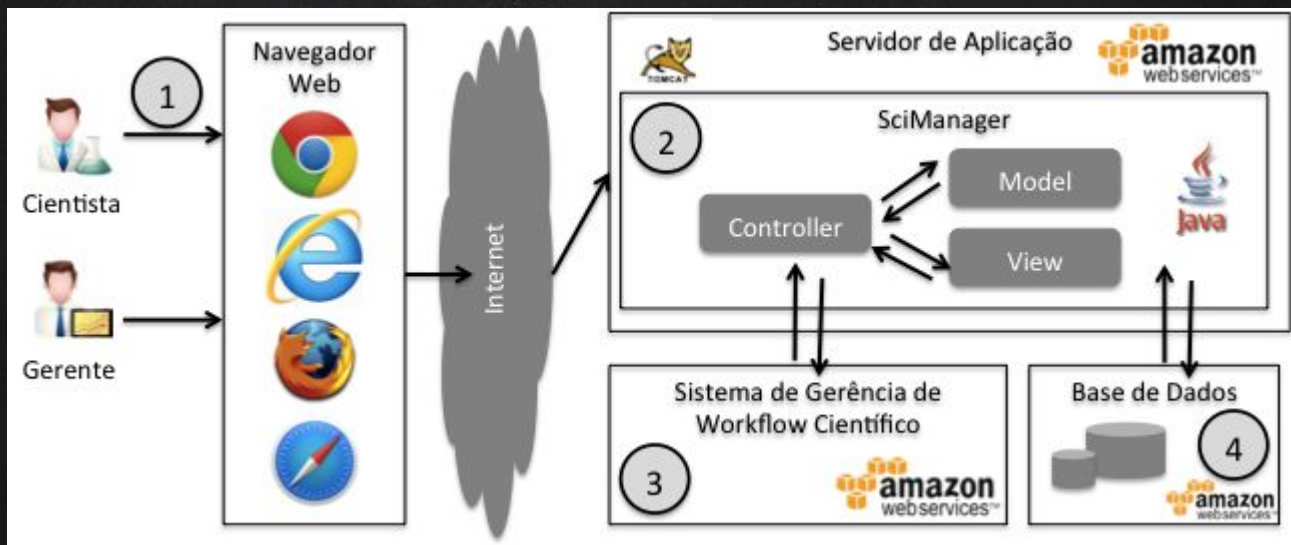




O SCIMANAGER ARQUITETURA



□ Arquitetura – Big Picture





O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Usuários

uff SciManager

Kary Ocaña

Gerenciamento de usuários

Buscar por... Buscar

Todos A B C D E F G H I J K L M N O P Q R S T U V W X Y Z

Usuário

Daniel de Oliveira
e-mail: danielcmo@c.uff.br
Instituição: UFF

Administrador

Kary Ocaña
e-mail: karyann@lncc.br
Instituição: LNCC

Administrador

Leonardo Ramos
e-mail: leonardosir@id.uff.br
Instituição: UFF

Usuário

Silvia Benza Bareiro
e-mail: silviabenza@cos.uff.br
Instituição: LNCC

Mudar perfil para Administrador

Total 4

Primeira Anterior 1 Próxima Última

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense uff SciManager



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Usuários

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark sidebar with a menu containing: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, **Usuários** (highlighted), and Tags. The main content area shows the 'Perfil' (Profile) page for a user named Kary Ocaña. A modal window titled 'Carregar imagem de perfil' (Upload profile picture) is open in the center. This modal features a large image upload area with a dashed crop box, a 'Carregar imagem' (Upload image) button, a preview of the selected image, a 'Salvar imagem' (Save image) button, and a row of icons for zooming and rotating. The background profile page includes the user's name, a partial profile picture, and contact information: 'Administrador', 'karyann@lncc.br', and 'LNCC'. Below the profile information is a green 'Editar perfil' (Edit profile) button. On the right side of the profile page, there is a section for 'Grupo responsável' (Responsible group) with a list of groups: 'Genômica Comparativa', 'Análise Filogenética', 'Análise Filogenética', and 'Genômica Comparativa', each with a magnifying glass icon.

uff SciManager

Perfil

Informações de

Kary Ocaña

Administrador
karyann@lncc.br
LNCC

Editar perfil

Carregar imagem de perfil

Carregar imagem

Salvar imagem

Grupo responsável

Genômica Comparativa

Análise Filogenética

Análise Filogenética

Genômica Comparativa

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense • uff SciManager



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Usuários

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, **Usuários** (highlighted), and Tags. The main content area is titled 'Perfil' and shows the profile of 'Kary Ocaña', an Administrator with email 'karyann@lncc.br' at 'LNCC'. A green 'Editar perfil' button is visible. The profile is associated with the project 'Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum'. Below the profile, a list of tasks is shown under the 'Tarefas recentes' tab:

- Estudo sobre o toolkit PhyML**
Limite: 18/02/2016
Projeto Científico: Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum
Estimativa: 2
Botão: Análise Filogenética
- Estudo sobre o toolkit ClustalW**
Limite: 07/03/2016
Projeto Científico: Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum
Estimativa: 3
- Estudo sobre o toolkit ModelGenerator**
Limite: 12/03/2016
Projeto Científico: Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum
Estimativa: 3
- Análise de dados de proveniência**
Projeto Científico: Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum
Estimativa: 3
- Análise dos genes do P. falciparum (PF08_0019, PF14_0027, PF10_0155, e PFL0190w)**
Projeto Científico: Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum
Estimativa: 15



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES




□ Gerência de Usuários

The screenshot displays the SciManager interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, **Usuários** (highlighted), and Tags. The main content area is titled 'Perfil' and shows the user's profile information and a list of workflows.

Perfil

Informações de usuário Relatório de atividades



Kary Ocaña
Administrador
karyann@lncc.br
LNCC
[Editar perfil](#)

Tarefas recentes Workflows

Nome do workflow	SGWiC	Projeto científico	Grupo responsável
SciPPgX	SciCumulus	Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa
SciPhy - Vivax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
SciPhy - Falciparum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética
SciHmm	SciCumulus	Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa

(4 de 4 workflows)

- Documentação
- Arquivos modelo
- Grafo macro
- Grafo detalhado

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense















O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Grupos de Usuários

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos (highlighted), Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Gerenciamento de grupos de usuários' and includes a search bar with 'Todos' and 'Meus' radio buttons, and a 'Buscar por...' input field. A green button 'Criar grupo de usuários +' is in the top right. The table below lists two groups:

Nome do grupo	Membros do grupo	
Análise Filogenética	  	  
Genômica Comparativa	  	  

A tooltip for 'Leonardo Ramos' is visible over the second user in the 'Genômica Comparativa' group. At the bottom right, pagination shows 'Total 2' and buttons for 'Primeira', 'Anterior', '1', 'Próxima', and 'Última'. The footer contains the text 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the SciManager logo.



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Projetos Científicos

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, **Projetos Científicos** (highlighted), Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Gerenciamento de projetos científicos' and includes a search bar with 'Todos' and 'Meus' filters, and a 'Buscar por...' input field. A green button 'Criar projeto científico +' is in the top right. Below is a table with the following data:

Nome do projeto científico	
Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	
Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	
Genômica Comparativa (Malária)	
Modelagem Molecular Cisteína Protease	

At the bottom right of the table area, it says 'Total 4'. Below the table are pagination controls: 'Primeira', 'Anterior', '1' (selected), 'Próxima', and 'Última'. The footer contains the text 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the SciManager logo.



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Projetos Científicos

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with the 'uff SciManager' logo and a menu containing: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, **Projetos Científicos** (highlighted), Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Gerenciamento de projetos científicos' and includes a search bar with 'Todos' and 'Meus' filters, and a 'Buscar por...' input field. Below the search bar, there's a 'Buscado por:' section with 'Modelagem' and 'Limpar busca' buttons. A green button 'Criar projeto científico +' is located in the top right of the project list area. The project list has a header 'Nome do projeto científico' and contains one entry: 'Modelagem Molecular Cisteino Protease'. To the right of this entry are icons for search, edit, and delete. At the bottom right, pagination controls show 'Total 1' and buttons for 'Primeira', 'Anterior', '1' (selected), 'Próxima', and 'Última'.



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Projetos Científicos

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with the 'uff SciManager' logo and a menu containing: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, **Projetos Científicos** (highlighted), Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Documentação de projeto científico' and shows a form for 'Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum'. The form includes a rich text editor with a toolbar (bold, italic, underline, text color, background color, font family, font size, bulleted list, numbered list, link, unlink, undo, redo, help) and a 'Code View' button. The text area contains 'Documentação do projeto. |'. To the right of the form are 'Cancelar' and 'Salvar' buttons. Further right, under 'Detalhes do projeto', are links for 'Visualizar workflows' and 'Visualizar fases'. The footer of the application indicates 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the 'uff SciManager' logo.









O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Fases

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, **Projetos Científicos** (highlighted), Grupos, Usuários, and Tags. The main content area has a header with the SciManager logo and a user profile 'Kary Ocaña'. Below the header, the title 'Gerenciamento de fases do projeto científico - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum' is shown next to a search bar. A table lists the project phases:

Nome da fase	
Análise	 
Composição	 
Execução	 

A green 'Criar fase +' button is located at the top right of the table. At the bottom right, a pagination bar shows 'Total 3' and buttons for 'Primeira', 'Anterior', '1' (selected), 'Próxima', and 'Última'. The footer contains the text 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the SciManager logo.



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Workflows Científicos

uff SciManager

Gerenciamento de workflows científicos

Todos: ☐ Meus ☒ Buscar por... Buscar

[Criar workflow +](#)

Nome do workflow	SGWIC	Projeto científico	Grupo responsável	
SciImm	SciCumulus	Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa	Editar workflow 🔍 ✎ 🗑
SciPhy - Falciparum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética	🔍 ✎ 🗑
SciPhy - Vvax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vvax	Análise Filogenética	🔍 ✎ 🗑
SciPPgX	SciCumulus	Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa	🔍 ✎ 🗑 <div>📄 Documentação 📄 Arquivos modelo 📄 Gráfico macro 📄 Gráfico detalhado</div>

Total 4

[Primeira](#) [Anterior](#) [1](#) [Próxima](#) [Última](#)

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense uff SciManager



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Workflows Científicos

uff SciManager

Gerenciamento de workflows científicos

Todos: ☐ Meus ☒ Buscar por...

Nome do workflow	SGWiC	Projeto científico	Grupo responsável
SciHim	SciCumulus	Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa
SciPhy - Falci-parum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falci-parum	Análise Filogenética
SciPhy - Vivax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
SciPPgX	SciCumulus	Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa

Buscar por projeto científico

Buscar...

Filtrar por grupo

Análise Filogenética

Limpar campos Buscar

Total 4

Primeira Anterior 1 Próxima Última

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense uff SciManager



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Workflows Científicos

uff SciManager

Gerenciamento de workflows científicos

Buscado por: **Análise Filogenética** Limpar filtro de grupo

Todos: ☐ Meus ☒ Buscar por...

Nome do workflow	SGWIC	Projeto científico	Grupo responsável
SciPhy - Falciparum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética <input type="button" value="🔍"/> <input type="button" value="✎"/> <input type="button" value="🗑️"/>
SciPhy - Vivax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética <input type="button" value="🔍"/> <input type="button" value="✎"/> <input type="button" value="🗑️"/>

Total 2



O SCIMANAGER FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Workflows Científicos

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos (highlighted), Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Documentação de workflow científico' and shows a workflow editor for 'SciPhys - Falciparum'. The editor includes a toolbar with icons for text formatting (bold, italic, underline, link, unlink, list, indent, outdent, undo, redo, search, help) and a text area containing a paragraph about genomic experiments. To the right of the editor is a 'Detalhes do workflow' panel with fields for 'Versão do workflow' (1.0), 'SGWC' (SciCumulus), 'Grupo responsável' (Análise Filogenética), and 'Arquivo modelo' (Visualizar modelo atual, Baixar modelo atual, Visualizar todos os modelos). A green button 'Carregar novo arquivo modelo' is at the bottom of the details panel. The footer of the interface reads 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense - SciManager'.



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES























□ Gerência de Arquivos do Workflow

uff SciManager

Arquivos modelo do workflow - SciPhy - Falciparum

Data inicial Data final Buscar

Carregar novo arquivo modelo

Uploader	Data de Submissão	Status	
Kary Ocaña	23/02/2016 - 23:06:53	Atual	 
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:44:06	Inativo	  
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:44:02	Inativo	  
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:43:22	Inativo	  
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:43:18	Inativo	  
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:36:32	Inativo	  
Leonardo Ramos	16/02/2016 - 19:25:36	Inativo	  

Comparar com modelo atual

Total 7

Primeira Anterior 1 Próxima Última

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense uff SciManager



O SCIMANAGER FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Arquivos do Workflow

Arquivo modelo

Modelo atual
Uploader: Kary Ocaña

```
<SciCumulus>
  <environment type="LOCAL" verbose="false"/>
  <constraint workflow_executable="workflow-filter-1" cores="2" performance="false"/>
  <workspace workflow_dir="/Users/vitor/Documents/Repository/SciCumulus/SciCumulus-Vitor/workflows/workflow-filter"/>
  <database name="scc2" username="scc2" password="scc2" port="5432" server="localhost"/>
  <conceptualWorkflow tag="workflow-filter" description="">
    <activity tag="act1" description="" type="FILTER" activation="",/experiment.cmd"
    template="%WDIR%/template_act1"/>
    <relation reltype="Input" name="IAct1"/>
    <relation reltype="Output" name="OAct1" />
    <extractor name="rd11" type="INDEXING" cartridge="CSV" search="file"/>
    <extractor name="d11" type="LOADING" cartridge="EXTERNAL_PROGRAM"
    invocation="",/extractor.cmd"/>
    <field name="IDENT" type="float" input="IAct1" output="OAct1"
    decimalplaces="0"/>
    <field name="FILE1" type="file" input="IAct1" output="OAct1"
    operation="COPY"/>
    <field name="FILE2" type="file" input="IAct1" output="OAct1"
    operation="COPY"/>
    <field name="K" type="float" output="OAct1" decimalplaces="0"
    extractor="rd11"/>
    <field name="TA" type="float" output="OAct1" decimalplaces="0"
    extractor="rd11"/>
    <field name="TB" type="float" output="OAct1" decimalplaces="0"
    extractor="rd11"/>
  </conceptualWorkflow>
</SciCumulus>
```

Detalhes do workflow

Versão do workflow
1.0

SGWC
SciCumulus

Grupo responsável
Análise Filogenética

Gráficos
Visualizar gráfico macro
Visualizar gráfico detalhado

Arquivo modelo
Visualizar modelo atual
Baixar modelo atual
Visualizar todos os modelos

Carregar novo arquivo modelo

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense SciManager



O SciMANAGER FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Arquivos do Workflow

The screenshot displays the SciManager web application interface. A modal dialog titled "Upload de arquivo modelo" is open in the center, showing a comparison of the current file with the uploaded one. The dialog contains a code editor with XML content for a workflow. Below the editor are two buttons: "Descartar arquivo carregado" (red) and "Usar arquivo carregado como atual" (green). The background interface includes a sidebar with navigation links like "Dashboard", "Quadros de Tarefas", and "Workflows Científicos". The main area shows "Documentação" and "Detalhes do workflow" for a specific workflow.

SciManager

Documentação

SciPhy - Falcipar

Today's genomic s
this huge amount of
computing (HPC) env
However, running bio
scientists to integrate
allow scientists for pr
This article brings
objective is to gather
benefit from parallel

Upload de arquivo modelo

Comparação do arquivo atual com o arquivo carregado

```
<SciCulmus>
<environment type="LOCAL" verbose="false"/>
<constraint workflow_exec="workflow-filter-synthetic-1" cores="85" performance="false"/>
<workspace workflow_dir="/Users/vitor/Documents/Repository/SciCulmus/SciCulmus-
Vitor/workflows/workflow-filter-synthetic"/>
<database name="scs2" username="scs2" password="scs2" port="5432" server="localhost"/>
<conceptualworkflow tag="workflow-filter-description" synthetic"/>
<activity tag="acti" description="" type="FILTER" activation="/experiment.cmd"
complete="loadLink/template.actiGatherDataFromRisers" type="SPLIT_MAP"
activation="java -jar /Users/vitor/Documents/Repository/SciCulmus/SciCulmus-
Vitor/workflows/workflow-synthetic/bin/Activator.jar TYPE=SPLITMAP ID=ID% SPLITMAP%<SPLITMAP%
SPLITFACTOR%<SPLITFACTOR% MAP1%<MAP1% MAP2%<MAP2% FILTER1%<FILTER1%
FILTERFACTOR1%<FILTERFACTOR1% FILTERB%<FILTERB% FILTERFACTOR2%<FILTERFACTOR2% REDUCE%<REDUCE%
REDUCEFACTOR%<REDUCEFACTOR% PATH=/Users/vitor/Documents/Repository/SciCulmus/SciCulmus-
Vitor/workflows/workflow-synthetic/files"/>
<relation reltype="Input" name="actiGatherDataFromRisers"/>
<relation reltype="Output" name="actiGatherDataFromRisers"/>
<extractor name="ndi" type="INDEXING" corridge="CSV" search="false" field name="ID" type="float"
input="IGatherDataFromRisers" outputs="OGatherDataFromRisers" decimalplaces="0"/>
<field name="SPLITMAP" type="float" input="IGatherDataFromRisers" decimalplaces="0"/>
<field name="SPLITFACTOR" type="float" input="IGatherDataFromRisers" decimalplaces="0"/>
<field name="MAP1" type="float" input="IGatherDataFromRisers" outputs="OGatherDataFromRisers"
decimalplaces="0"/>
<field name="MAP2" type="float" input="IGatherDataFromRisers" outputs="OGatherDataFromRisers"
decimalplaces="0"/>
<field name="FILTER1" type="float" input="IGatherDataFromRisers" output="OGatherDataFromRisers">
```

Detalhes do workflow

Versão do workflow
1.0

SGWC
SciCulmus

Grupo responsável
Análise Filogenética

Gráficos
Visualizar grato macro
Visualizar grato detalhado

Arquivo modelo
Visualizar modelo atual
Baixar modelo atual
Visualizar todos os modelos

Carregar novo arquivo modelo

Descartar arquivo carregado Usar arquivo carregado como atual

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense SciManager



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Grafo do Workflow

uff SciManager

Kary Ocaña

Grafo macro do workflow - SciPhy - Falciparum

Cancelar Salvar

Adicionar nó Adicionar ligação Editar nó Editar ligação Remover nó Remover ligação

Gerar grafo a partir de arquivo modelo atual

Nó de origem
PreProcessing

Nó de destino
AnalyzeRisers

Nota na ligação
Anotação

Cancelar Adicionar

```
graph LR; PreProcessing --> AnalyzeRisers; AnalyzeRisers --> CalculateWearAndTear; AnalyzeRisers --> AnalyzePosition; CalculateWearAndTear --> JoinResults; AnalyzePosition --> JoinResults; JoinResults --> Finalizacao; Finalizacao --> CompressResults;
```

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense uff SciManager



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Grafo do Workflow

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos (highlighted), Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Grafo detalhado do workflow - SciPhy - Falciparum' and includes a 'Cancelar' button and a 'Salvar' button. Below the title is a toolbar with six icons: Adicionar nó, Adicionar ligação, Editar nó, Editar ligação, Remover nó, and Remover ligação. A modal window is open over the main workspace, titled 'Tipo do nó', with a dropdown menu set to 'Arquivo de dados' and a text input field for 'Nome do nó'. The main workspace shows a workflow graph with three nodes: 'Atividade 1' connected to 'Arquivo Gerado' (labeled 'processamento'), which is connected to 'Atividade2' (labeled 'finalizacao'). At the bottom right, there is a footer: 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the SciManager logo.



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



Gerência de tarefas do Projeto Científico

Criar tarefa

Detalhes

Título *

Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Descrição

Verificar a estrutura dos genes [PF08_0019](#), [PF14_0027](#), [PF10_0155](#) e PFL0190w

URL do repositório

URL

Dias estimados

15

Data limite

17/03/2016

Fase *

Análise

Workflow *

SciPhy - Falciparum

Responsável

Grupo (Análise Filogenética) ☒ Usuários ☐

Adicionar tags

falciparum * PF14_0027 * PF10_0155 * PFL0190w *

Adicionar tag

Cancelar

Salvar



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico

The image shows a screenshot of the SciManager web application interface. A modal window titled 'Criar tarefa' (Create task) is open, displaying a form for creating a new task. The form includes fields for Title, Description, Repository URL, Estimated days, Deadline date, Phase, Workflow, Responsible user, and a list of users to add tags. The background shows the main dashboard with a sidebar menu and a list of tasks.

ufjf SciManager

Quadro de Tarefas

A fazer (5 de 5 tarefas)

Execução do conjunto de tarefas

Limite: 08/02/2016

Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Estudo sobre o toolkit RAXML

Criar tarefa

Detalhes

Título * Análise dos genes do P. falciparum (PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w)

Descrição Verificar a estrutura dos genes PF08_019, PF14_0027, PF10_0155 e PFL0190w

URL do repositório URL

Dias estimados 15

Data limite 17/03/2016

Fase * Análise

Workflow * SciPhy - Falciparum

Responsável Grupo (Análise Filogenética) ☐ Usuários: ☒

Nome do usuário Kary Ocaña

Adicionar tags

- Silvia Benza Benza
- Daniel de Oliveira

Cancelar Salvar



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico

The screenshot displays the SciManager web interface for a project titled "Quadro de tarefas - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum". The interface is organized into three main columns: "A fazer" (To do), "Em progresso" (In progress), and "Concluído" (Completed). Each column contains task cards with details such as task name, estimated effort, due date, and status. A sidebar on the left provides navigation options like Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags. The top right corner shows the user's name, Kary Ocaña, and search filters for initial and final dates.

SciManager Kary Ocaña

Quadro de tarefas - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum

Data inicial Data final Buscar por... Buscar

Todas Minhas

A fazer (5 de 5 tarefas)

- Execução do SciPhy com conjunto de 150 arquivos multi-fasta
Estimativa: 1
Limite: 08/02/2016
Análise Filogenética
- Análise dos genes do P. falciparum (PF08_0019, PF14_0027, PF10_0155, e PFL0190w)
Estimativa: 15
Análise Filogenética
- Análise dos dados da ativação 123
Estimativa: 3
Limite: 28/02/2016
Falciparum
- Análise dos dados da ativação 445
Estimativa: 3
Falciparum
- Estudo sobre o toolkit RAXML
Análise Filogenética

Em progresso (4 de 4 tarefas)

- Estudo sobre o toolkit PhyML
Estimativa: 2
Limite: 18/02/2016
Análise Filogenética
Falciparum
- ClustalW
Estimativa: 5
Falciparum
- Estudo sobre o toolkit ModelGenerator
Estimativa: 5
Limite: 12/03/2016
Falciparum
- Estudo sobre o toolkit MAFFT
Estimativa: 5
Falciparum

Concluído (4 de 4 tarefas)

- Análise dos dados da ativação 123
Estimativa: 3
Limite: 28/02/2016
Falciparum
- Análise dos dados da ativação 456
Estimativa: 11
Limite: 02/03/2016
Análise Filogenética
Falciparum
- Análise dos dados da ativação 263
Estimativa: 5
Limite: 05/03/2016
Falciparum
- Análise dos dados da ativação 4987
Estimativa: 2
Análise Filogenética
Falciparum

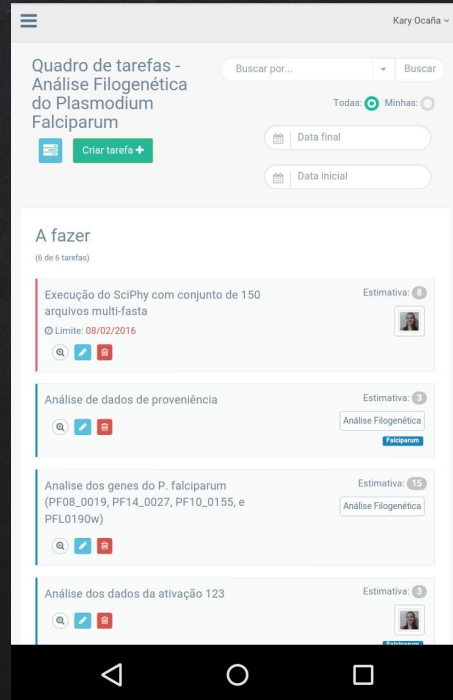


O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico





O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas (highlighted), Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is titled 'Quadro de tarefas - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum'. It includes a 'Criar tarefa +' button, a search bar with 'Buscar por...' and a 'Buscar' button, and a filter section with 'Analise' and 'SciPhy - Falciparum' tabs. The tasks are organized into three columns: 'A fazer' (1 de 1 tarefas), 'Em progresso' (0 de 0 tarefas), and 'Concluído' (0 de 0 tarefas). The 'A fazer' column contains a task card for 'Análise de dados de proveniência' with an 'Estimativa: 1' label and a 'Falar sobre' button. The footer shows 'Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense' and the SciManager logo.



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico

uff SciManager

Dashboard

Quadros de Tarefas

Workflows Científicos

Projetos Científicos

Grupos

Usuários

Tags

Tarefas - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum

Data inicial Data final

Buscar por... Buscar

Todas Minhas

Criar tarefa +

Status	Título	Responsável	Fase	Dias estimados	Data limite	Tags
A fazer	Execução do SciPhy com conjunto de 150 arquivos multi-fasta		Execução	1	08/02/2016	--
Em progresso	Estudo sobre o toolkit PhyML	Análise Filogenética	Composição	2	18/02/2016	Falciparum
Concluído	Análise dos dados da ativação 123		Análise	1	28/02/2016	--
Concluído	Análise dos dados da ativação 456	Análise Filogenética	Análise	11	02/03/2016	Falciparum
Concluído	Análise dos dados da ativação 263		Análise	5	05/03/2016	Falciparum
	Estudo sobre o toolkit ClustalW		Composição	5	07/03/2016	--
	Estudo sobre o toolkit ModelGenerator		Composição	5	12/03/2016	--
A fazer	Análise dos genes do P. falciparum (PF08_0019, PF14_0027, PF10_0155, e PFL0190w)	Análise Filogenética	Análise	15	--	--
A fazer	Análise dos dados da ativação 123		Análise	3	--	Falciparum
Concluído	Análise dos dados da ativação 4987	Análise Filogenética	Análise	2	--	Falciparum

Editar status

A fazer

x ✓



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de tarefas do Projeto Científico

uff SciManager

Tarefas - Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum

Data inicial Data final Buscar por... Buscar

Todas Minhas

Criar tarefa +

Status	Título	Responsável	Fase	Dias estimados	Data limite	Tags
A fazer	Execução do SciPhy com conjunto de 150 arquivos multi-fasta		Execução	1	08/02/2016	--
Em progresso	Estudo sobre o toolkit PhyML	Análise Filogenética	Composição	2	18/02/2016	Falciparum
Concluído	Análise dos dados da ativação 123		Análise	1	28/02/2016	--
Concluído	Análise dos dados	Análise Filogenética	Análise	11	02/03/2016	Falciparum
Concluído	Análise dos dados		Análise	5	05/03/2016	Falciparum
Em progresso	Estudo sobre o		Composição	5	07/03/2016	--
Em progresso	Estudo sobre o toolkit		Composição	5	12/03/2016	--
A fazer	Análise dos genes do Plasmodium falciparum (genes PF14_0027, PF10_0155, e PFL0190w)	Análise Filogenética	Análise	15	--	--
A fazer	Análise dos dados da ativação 123		Análise	3	--	Falciparum
Concluído	Análise dos dados da ativação 4987	Análise Filogenética	Análise	2	--	Falciparum

Detalhes

Criada por: Kary Ocaña

Criada em: 16/02/2016

Workflow: SciPhy - Falciparum

Descrição: Verificar a estrutura dos genes PF08_0019, PF14_0027, PF10_0155, e PFL0190w

URL do repositório: https://bitbucket.org/danielcmoiscientific_project_management



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Gerência de Tags

The screenshot displays the SciManager web application interface. On the left is a dark blue sidebar with a menu containing: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags (which is highlighted). The main content area is titled 'Gerenciamento de tags' and includes a search bar with the placeholder 'Buscar por...' and a 'Buscar' button. A green button labeled 'Criar tag +' is located in the top right corner of the table area. The table lists four tags with their names and associated actions (edit and delete icons).

Nome da tag	#Ações
Falciptarum	
PF-10_0155	
PF-14_0027	
PFL0190w	

At the bottom right of the table area, it shows 'Total 4'. Below the table is a pagination bar with buttons: Primeira, Anterior, 1 (active), Próxima, and Última.

Projeto Final de Graduação pela Universidade Federal Fluminense SciManager



O SciMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Tela inicial – Dashboard

The screenshot shows the SciManager Dashboard for user Kary Ocaña. The interface includes a sidebar with navigation links: Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags. The main content area is divided into several sections:

- Bem vindo(a) Kary Ocaña**: A welcome message and a brief description of the SciManager system.
- Minhas tarefas (5 de 5 tarefas)**: A list of tasks with details such as title, limit, project, and a search icon.
- Meus quadros de tarefas (4 de 4 quadros de tarefas)**: A table showing tasks organized by project and administrative groups.
- Meus workflows (4 de 4 workflows)**: A table showing workflows with columns for name, SGWIC, project, and responsible group.

Projeto científico	Grupos administradores
Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética
Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa
Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa

Nome do workflow	SGWIC	Projeto científico	Grupo responsável
SciPPgX	SciCumulus	Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa
SciPhy - Vivax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
SciPhy - Falciparum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética
SciHmm	SciCumulus	Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa



O SCIMANAGER

FUNCIONALIDADES



□ Tela inicial – Dashboard

The screenshot shows the SciManager Dashboard for user Kary Ocaña. The interface is divided into several sections:

- Left Sidebar:** Contains navigation icons for Dashboard, Quadros de Tarefas, Workflows Científicos, Projetos Científicos, Grupos, Usuários, and Tags.
- Top Header:** Displays the user's name, Kary Ocaña, and a menu icon.
- Bem vindo(a) Kary Ocaña:** A welcome message with a brief description of SciManager as a project management system developed by Leonardo Ramos for the UFF.
- Minhas tarefas (6 de 6 tarefas):** A list of tasks with details such as title, limit date, project name, and a search icon. Tasks include "Estudo sobre o toolkit PhyML", "Estudo sobre o toolkit ClustalW", "Estudo sobre o toolkit ModelGenerator", and "Análise de dados de proveniência".
- Meus quadros de tarefas (4 de 4 quadros de tarefas):** A table showing project and administrative tasks.
- Meus workflows (4 de 4 workflows):** A table showing workflow details, including workflow name, SGWIC, project name, and responsible group.

Projeto científico	Grupos administradores
Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética
Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa
Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa

Nome do workflow	SGWIC	Projeto científico	Grupo responsável
SciPPgX	SciCumulus	Modelagem Molecular Cisteino Protease	Genômica Comparativa
SciPhy - Vivax	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Vivax	Análise Filogenética
SciPhy - Falciparum	SciCumulus	Análise Filogenética do Plasmodium Falciparum	Análise Filogenética
SciImm	SciCumulus	Genômica Comparativa (Malária)	Genômica Comparativa

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL



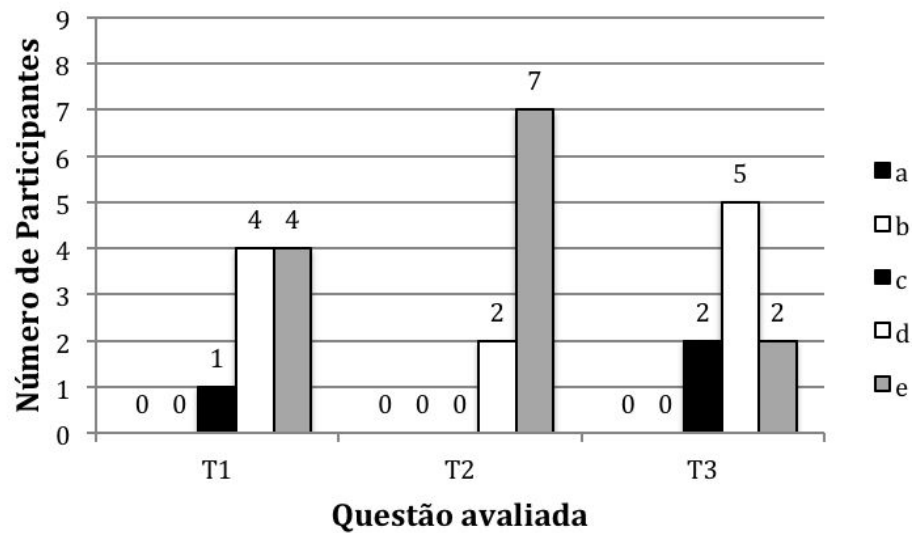
- De forma a avaliar a abordagem proposta foi utilizado o modelo de avaliação denominado TAM (Technology Acceptance Model)
- Avaliar a receptividade/comportamento de um usuário no que se refere a utilidade e a facilidade da tecnologia/ferramenta que está sendo proposta
- Utilidade refere-se ao quanto o usuário acredita que a abordagem proposta o auxiliará em suas tarefas e a facilidade se refere ao quão fácil/simples será utilizar tal abordagem

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL

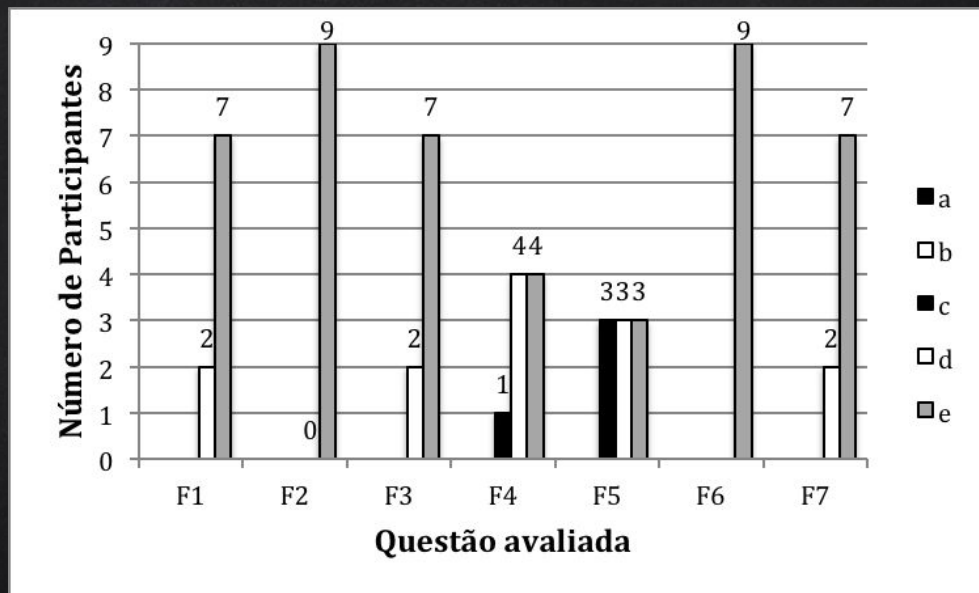


- Criação de um questionário indagando a facilidade de uso do SciManager
- Candidatos a avaliar: alunos da graduação e pós graduação com um mínimo conhecimento prévio sobre o domínio abordado
- A avaliação experimental mostrou que mais de 88% dos avaliadores acredita que o uso do SciManager agrega valor ao seu trabalho e, possivelmente melhorará o desempenho do projeto científico

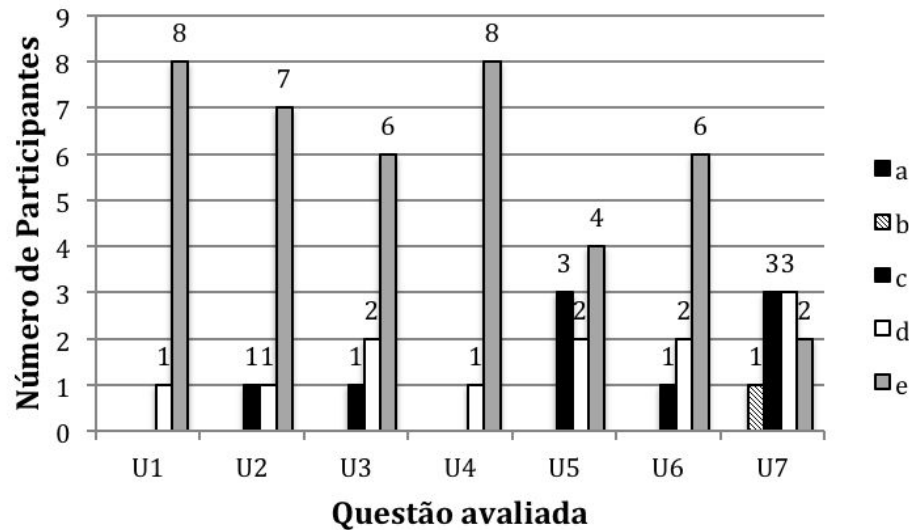
AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL



AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL



AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL



TRABALHOS RELACIONADOS



1. LabGuru
2. Trello
3. Tasker
4. Redmine
5. Jira

- ☐ Não há associação com o conceito de experimento científico e nem mecanismos para especificar um workflow ou executá-lo em um SGWfC existente
- ☐ Alguns desses sistemas são pagos (Jira)

CONCLUSÃO



Gerenciar um projeto científico é uma tarefa nada trivial, distribuir tarefas, medir esforços despendidos, e controlar a equipe são tarefas muito complexas. A área de gerência de projetos já trata de problemas semelhantes em diversas áreas como no desenvolvimento de software. Entretanto, a gerência de um projeto científico possui peculiaridades e características únicas. Dessa forma, ferramentas específicas para a gerência do projeto científico se fazem necessárias.

OBRIGADO



Dúvidas?

Contato: leoslramos@gmail.com