

Oferta ou Roubo: avaliando abordagens de escalonamento dinâmico para Workflow scRNA-seq na nuvem AWS

Erik Izidoro, Cristina Boeres, Vinod Rebello

Curso de Ciência da Computação
Instituto de Computação, Universidade Federal Fluminense (UFF)

Introdução

O Desafio da Execução de Workflows scRNA-seq

- Qual a importância do **sequenciamento de célula única**?
- O workflow **CellHeap** [Silva et al. 2021] apresenta elevado custo computacional
- A infraestrutura da nuvem se estabelece enquanto base bem consolidada para a execução de aplicações de **Computação de Alto Desempenho**
- Surge, assim, a necessidade de estudar maneiras de explorar os recursos fornecidos pela nuvem para atender às necessidades dessas aplicações

Busca-se otimizar o uso dos recursos disponíveis, reduzindo tempos de execução e custos monetários

Objetivo

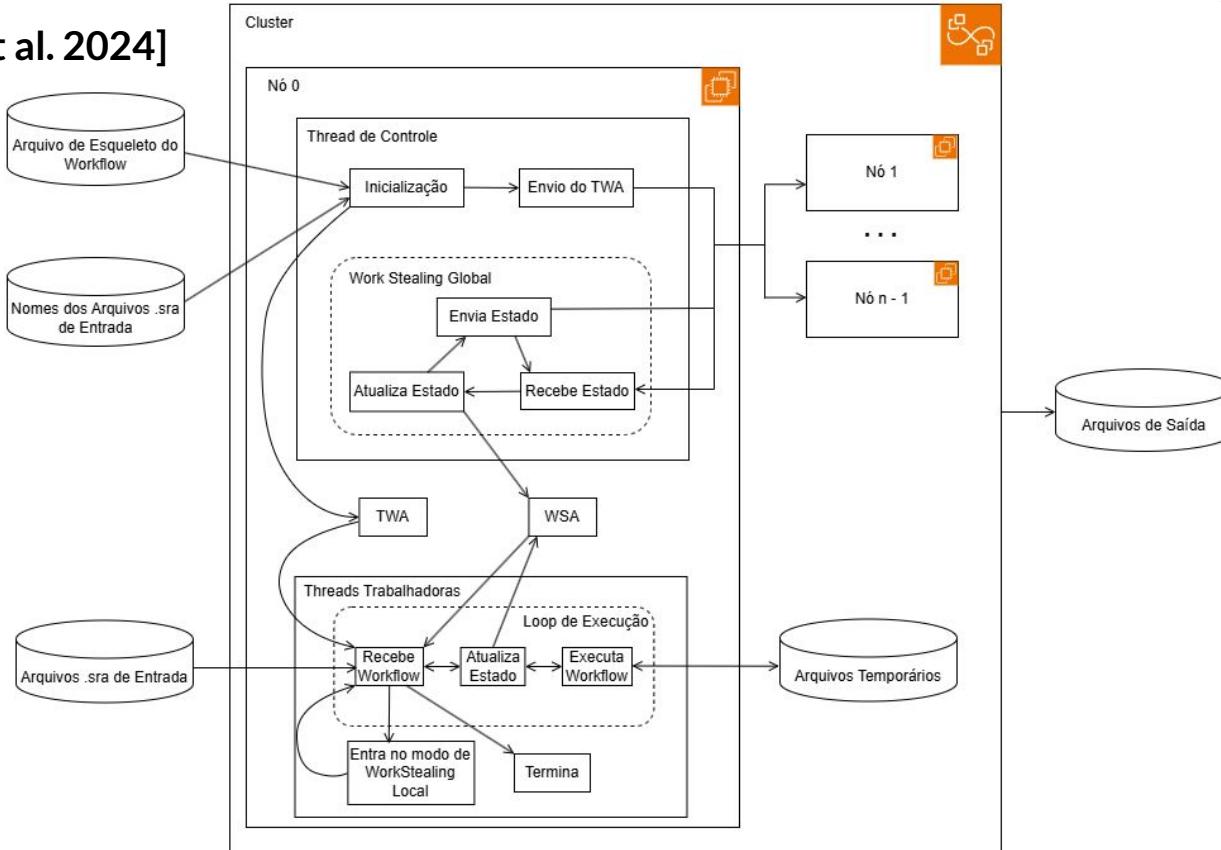
Avaliar Estratégias de Escalonamento Dinâmico

- Este trabalho foca na **primeira fase** do **CellHeap** como workflow de execução
 - **Etapa de pré-processamento de dados com geração de arquivos intermediários**
- Avalia-se a **ferramenta de orquestração** [Silva et al. 2024] que distribui os workflows
 - São analisadas duas **abordagens** de escalonamento dinâmico
 - **Work-Stealing (WS)**: abordagem original
 - **Master-Workers (MW)**: abordagem proposta
- O **ambiente de experimentação** é providenciado pela nuvem AWS
 - **AWS Elastic Cloud Computing (EC2) e Parallel Cluster**

Base de Comparação

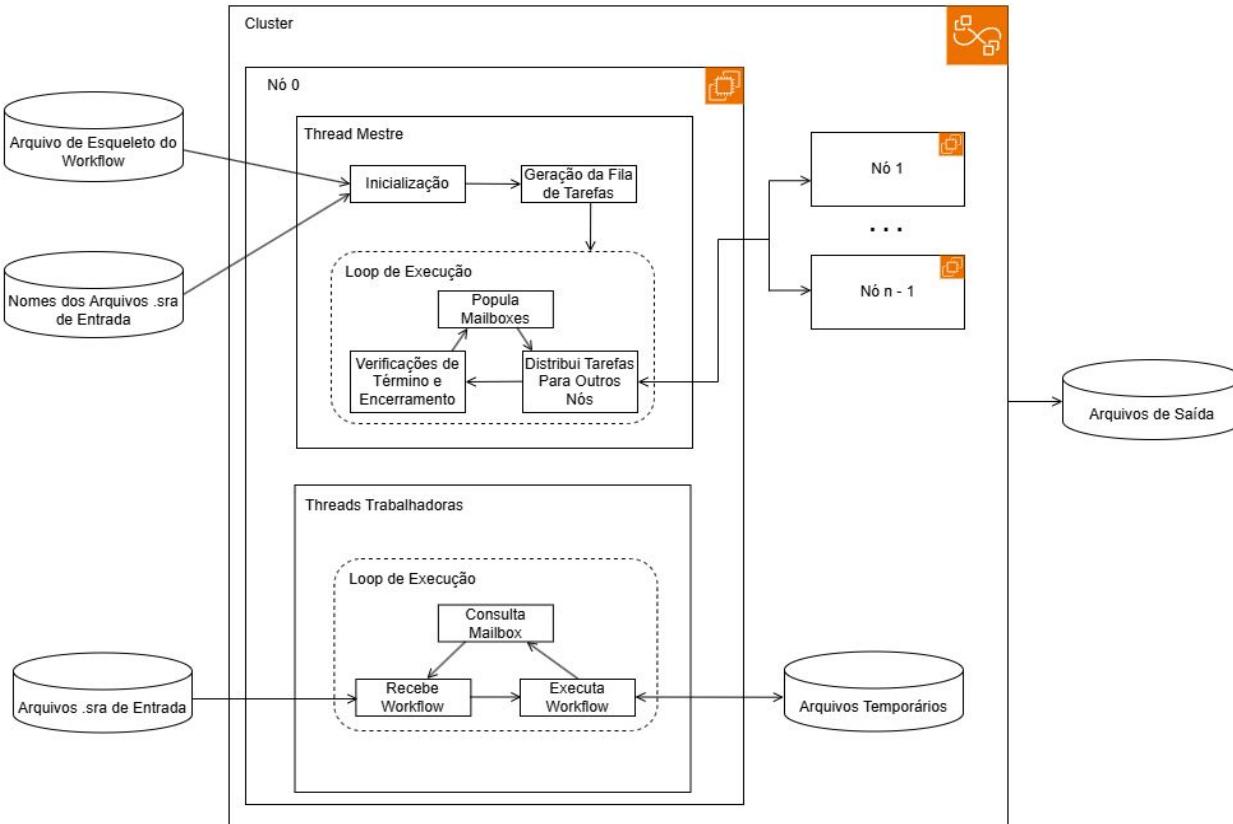
Abordagem WS

Fonte: [Silva et al. 2024]



Proposta

Abordagem MW



Especificações Experimentais

Nós do Cluster (Instâncias do EC2)

- Instância generalista: **m6idn.2xlarge**
 - Intel Xeon 8375C, 8 vCPUs, 32 GiB de Mem. RAM, 437 GB SSD e até 40 Gbps de banda larga de rede
 - Linux



Dataset

- PRJNA743046, disponível no **NCBI**

Sistema de arquivos

- **AWS FSx for Lustre**

Resultados

Nº de Nós	Nº de Threads por Nó	T_{MW}	T_{ws}	Ganho %
2	4	2714s	2404s	-12,89%
2	5	2652s	2408s	-10,13%
4	4	477s	599s	20,36%
4	5	425s	456s	6,79%
8	4	235s	308s	23,70%
8	5	210s	246s	14,63%
16	4	121s	169s	28,40%
16	5	108s	137s	21,16%

Conclusão

Como as abordagens se comparam em relação ao desempenho?

- Ambas as abordagens demonstram desempenho semelhante quando estruturadas nas mesmas configurações
- A abordagem MW se mostra competitiva com a abordagem WS, apresentando tempos de execução menores na maioria dos casos estudados
- Avalia-se os porquês dos resultados obtidos
 - Centralização x Descentralização
 - Sobrecarga de comunicação/sincronização
 - Sobrecarga de escalonamento

Trabalhos Futuros e Agradecimentos

Perspectivas para Avaliações Futuras

- Exploração da configurabilidade dos serviços utilizados
- Avaliação da possibilidade de incorporação e análise do serviço *Simple Queue Service (SQS)* no contexto do trabalho
- Análise da eficiência das abordagens do gerenciador frente a datasets de maior tamanho
- Exploração das limitações das abordagens MW e WS e da possibilidade da implementação de uma abordagem híbrida

Agradecimentos

- Projeto CNPq/AWS (processo 421828/2022-6)

Fim da Apresentação

Referências Bibliográficas

- [Silva et al. 2021] Silva, V. et al. (2021). CellHeap: A workflow for optimizing COVID-19 single-cell RNASeq data processing in the Santos Dumont supercomputer. In Brazilian Symposium on Bioinformatics, pages 41–52. Springer.
- [Silva et al. 2024] Silva, H. S., Castro, M. C., Silva, F. A., and Melo, A. C. (2024). A framework for automated parallel execution of scientific multi-workflow applications in the cloud with work stealing. In European Conference on Parallel Processing, pages 298–311. Springer.