



Конвейер bowtie-based анализа метагеномных данных v3



















- Volume (объем)
- Variety (разные типы)
- Velocity (скорость генерации)
- Veracity (достоверность)

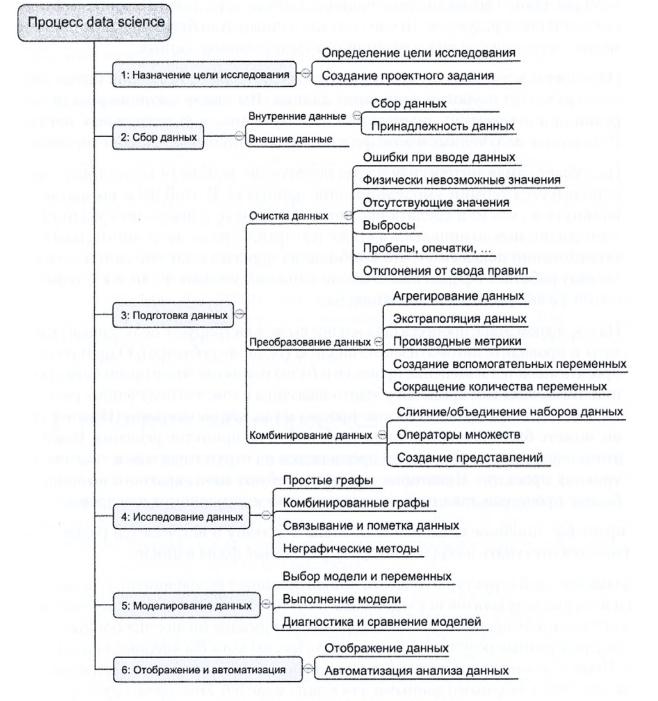


Рис. 2.1. Структура процесса data science

Дэви Силен, Арно Мейсман, Мохамед Али

Python

и наука о данных

MANNING



Конвейер ThreeBees: возникшие проблемы и их решения

- SQL-сервер виснет при доступе к покрытиям генов
 - Экспорт покрытий генов обратно в текстовый формат и их сведение для каждого конкретного сравнения
- Синтаксис SQL оказался сложен для понимания большинством сотрудников
 - Создание фронтенда под сбор метаданных
 - Отказ от использования SQL-сервера
- Высоконагруженный код на R трудно сделать эффективным
 - Распараллеливание инстансов R
 - Рефакторинг на python
- Некоторые файлы не помещаются в оперативной памяти
 - Парсинг по частям
- Метод отслеживания «бутылочных горлышек» учитывает число процессорных потоков, но не отслеживает потребление процессорного времени, ОЗУ, дискового кэша и т.д.
 - asyncio
 - Требуется доработка алгоритма создания очереди
 - Принудительный перевод нагруженных процессов в однопоточные очереди
- За состоянием кластера должен следить системный администратор
 - Культура DevOps позволяет перенести ответственность за состояние ПО на разработчика
- На каждой ноде кластера должен присутствовать актуальный код
 - Код сбрасывается в расшаренное хранилище
 - CD/CI
- Сложно отследить версию кода в общем хранилище
 - git
- Запуск обработки большого числа файлов должен производиться одновременно на нескольких нодах
 - Ansible
- Приходится вручную расписывать очереди для нод
 - Kubernetes + Redis

Структура кластера НИЛ OpenLab "Омиксные технологии" КФУ

• Железо

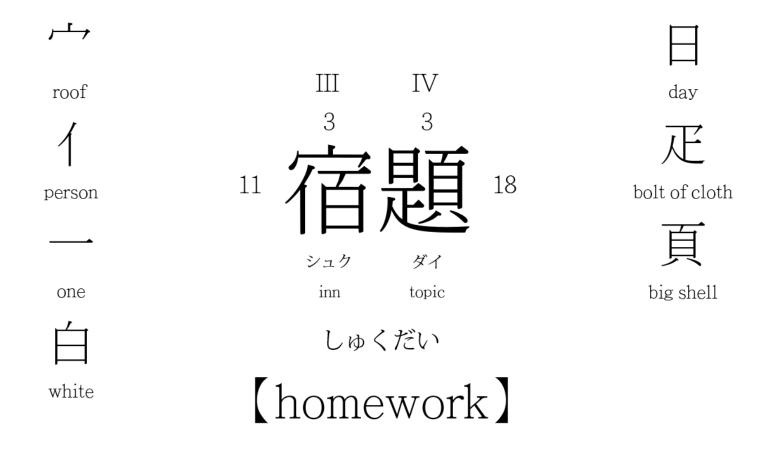
- 3 NAS-сервера
 - 1x 15 T6 RAID1
 - 2x 36 T6 RAID1
- 10 вычислительных нод
 - 4x Xeon E5-2630 v2 x2 (24 потока), 64 Гб ОЗУ
 - 6x Xeon E5-2630 v3 x2 (32 потока), 128 Гб ОЗУ
- Сеть 1000Base-T
- Софт
 - CaaS on Bare Metal
 - Ubuntu Server 16.04 LTS + Ansible v2.4.3.0 + Docker v17.03 + Calico v1.6.1 + Kubernetes v1.9.3
 - CD/CI
 - git + DockerHub AutoBuilds / Resilio Sync / Jenkins

Уровни абстракции рабочего процесса конвейера biopipelines-docker/bwt_filtering_pipeline

- Программа-звено конвейера
 - C / C++ / Python etc.
- Управляющий скрипт конвейера
 - Python (CWL?) / bash / Perl etc.
- Под-воркер
 - Python-скрипт выгрузки очереди с Redis-сервера с временным интервалом
 - Инициализация конвейера при $N_{\text{очереди}} = N_{\text{ядер}}$ или при преждевременно опустошенной очереди
- Под-мастер
 - Python-скрипт построчной загрузки очереди JSON-объектов на Redis-сервер
- Конфигурация подов
 - YAML-шаблоны с поддержкой Jinja2
- Конфигурация проекта
 - HELM YAML-чарт с необходимой конфигурацией

Продакшн-схема конвейера biopipelines-docker/bwt_filtering_pipeline

- 1. Создаются линкерные таблицы
 - Пути к файлам референса
 - Пути к файлам образцов
 - Групповые метаданные
- 2. Создаются файлы конфигурации субпроекта
 - Главный чарт config.yaml создается вручную
 - Чарты мастера и воркеров (*master.yaml* и *worker.yaml*) генерируются скриптом из соответствующих шаблонов
 - Все три файла перемещаются в папку субпроекта и выгружаются
- kubectl разворачивает мастер, который выгружает очередь из JSONобъектов в указанную очередь на Redis-сервер
- 4. kubectl разворачивает задание (job, не deployment) и контроллер репликации воркеров
- 5. На доступных нодах разворачивается указанное число воркеров, каждый из которых загружает очередь с Redis-сервера через определенный интервал времени
- 6. Воркер запускает работу конвейера



Проект "Kubernetes Cluster on Bare Metal"

- 1. Поднять на своем хосте 3 виртуальных машины
 - Ubuntu Server 16.04 LTS (core, no GUI)
 - Имена: node0, node1, node2
 - Установить пакеты
 - openssh-client openssh-server python sshpass apt-transport-https ca-certificates curl software-properties-common git python-pip python3-pip
- 2. Настроить сетевое окружение
 - Имя в /etc/hostname
 - Имена и IP-адреса в /etc/hosts
 - NAS-сервер на node0 (указать папку /data в /etc/fstab)
 - SSH-сервер в /etc/ssh/sshd_config
 - Авторизация по SSH-ключам без запроса пароля (см. *ssh-copy-id*)
- 3. Установить на *nodeO* Ansible, Netaddr и сконфигурировать окружение Ansible
- 4. Установить Docker и Kubernetes
- 5. Добиться корректной работы команд kubectl get nodes и kubectl get pods --show-all