

PAPER REVIEW: MPO: A SYSTEM AND ANALYZE DISTRIBUTED HETEROGENEOUS WORKFLOWS

JOURNAL	AUTORES	LINK - SCOPUS	COMPILADO POR
International Provenance and Annotation Workshop	K. Wu, E. N. Coviello, S.M. Flanagan, M. Greenwald, X. Lee, A. Romosan, D.P. Schissel, A. Shoshani, J. Stillerman, J. Wright	https://goo.gl/XoeH19	Luiz Gustavo Dias - UFF

RESUMO

Experimentos científicos produzem grandes quantidades de dados, embora menores em volume, os metadados são tão importantes na descoberta científica quanto os dados brutos. Metadados podem ser capturados automaticamente por sistemas de gerenciamento de workflows ou plugins do sistema operacional. No entanto há muitos casos em que esses sistemas são insuficientes quando por exemplo os metadados precisam ser inseridos manualmente nos sistemas, ou serão perdidos. Para automatizar a captura de metadados nesses casos, os autores desenvolveram um sistema genérico de captura e análise de metadados chamado MPO (metadata, proveniência, ontologia). Que pode ser integrado perfeitamente na maioria dos ambientes de análise de dados e requer uma quantidade mínima de alterações nos programas de análise existentes. Os usuários têm o controle total de como instrumentar seus programas para capturar o máximo ou mínimo de informações. Além de poder projetar controlar e evoluir ainda mais a ontologia usada para descrever o workflow.

VISÃO GERAL

Conjuntos de dados coletados e gerados a partir de cálculos, passam por inúmeras etapas de análise durante o desenvolvimento do conhecimento científico. Esses processos de geração, conversão, manipulação e transformação de dados são frequentemente formalizados e codificados em sequências de etapas conhecidas como *workflows*. Embora os metadados sejam geralmente muito menores em volume do que os dados brutos, eles contêm informações críticas, como organização dos dados brutos, sua origem, e como os dados de inúmeras cadeias devem ser interpretados. Nesta pesquisa, os autores focam em dois tipos específicos de metadados conhecidos como proveniência e ontologia. Proveniência são os metadados que descrevem como um conjunto de dados é derivado ou processado. É de particular interesse porque é importante que os cientistas produzam a análise dos dados e estudem o processo de análise. Ontologia é uma nomenclatura e definição formal de tipos, propriedades e inter-relações das entidades para um domínio particular da ciência.

Existem muitas colaborações de pesquisa ativas com décadas de histórico e grandes conjuntos de workflow que não estão em nenhum dos modernos sistemas de gerenciamento de workflow, além disso, um grande workflow pode envolver uma colaboração estendida e abranger diversos sistemas de computadores. Nesse caso, os cientistas precisam inserir manualmente as partes críticas dos metadados, incluindo as informações de proveniência. A inserção manual de metadados exige que os cientistas interrompam suas atividades no processo de análise de dados e diminua potencialmente sua produtividade, o que diminui a chance de que os metadados sejam inseridos em tempo hábil. Além disso, não há uma maneira fácil de impor uma ontologia consistente em um ambiente distribuído. Inconsistências na terminologia usada na descrição dos workflows e produtos de dados pode causar confusão em seus usos posteriores e reduzir o valor dos produtos de dados, o que reduz ainda mais a motivação dos usuários para inserir metadados sobre seu trabalho. Claramente, automatizar a captura de metadados e usar ontologias consistentes é essencial para resolver essas dificuldades. O principal desafio é fazer isso em um workflow complexo em um ambiente distribuído.

A proposta dos autores ao problema de captura de metadados distribuídos é um sistema que funciona com qualquer plataforma de computação, captura informações de workflows executados em qualquer lugar e exige uma

quantidade mínima de modificações nos componentes existentes. O sistema é conhecido como MPO. O artigo resume o status do projeto, desenvolvimento e teste do sistema. O software MPO consiste em um modelo de dados, uma API para capturar informações, um banco de dados para armazenar as informações capturadas e um serviço da web para analisar as informações capturadas. Os workflows são representados como gráficos acíclicos direcionados, fornecendo informações explícitas sobre os relacionamentos entre dados e ações do workflow.

CONCEITOS BÁSICOS

O sistema MPO documenta atividades de pesquisa científicas rastreando workflows experimentais e computacionais. O objetivo é organizar os metadados e partir de uma ampla variedade de aplicativos e apoiar uma diversidade de operações de análise. Foi necessário definir um vocabulário comum básico:

- **Objeto de dados:** Uma unidade de informação relacionada a uma atividade ou pesquisa científica. Seu tamanho depende do aplicativo. Pode ser um grande conjunto de dados, um único valor, um gráfico ou uma coleção de trabalhos de pesquisa. Na maioria dos casos é útil referir-se a ele como um único objeto porque é produzido ou consumido por um programa de computador como uma unidade. Pode ser armazenado em um arquivo. MPO mantém um ponteiro na forma de um URI (uniform resource identifier) que identifica os dados e seus métodos de acesso. Ele monitora os objetos de dados de duas maneiras: A primeira é a informação geral sobre os próprios objetos de dados, como uri, comentários gerais e metadados; A segunda é o uso específico do objeto de dados em um workflow, como comentários sobre o uso do objeto de dados em um workflow.
- **Atividade:** Qualquer coisa que crie, moda ou transmute dados de um formulário para outro. Uma atividade pode consumir vários objetos de dados de entrada e produzir um ou mais objetos de dados como saída. Exemplos de atividades incluem importação de dados, pré-processamento, preparação de entrada, corridos de execução, armazenamento de dados, pós-processamento, plotagem e exportação de dados;
- **Conexão:** Link entre múltiplas atividades ou objetos de dado.
- **Workflow:** Uma série de objetos de dados e atividades conectados, organizados como um gráfico acíclico direcionado (DAG). Um workflow mostra as etapas individuais na cadeia de processamento e o relacionamento pai-filho entre seus elementos (objetos de dados e atividades). A definição atual de workflow para os autores não pode incluir loops. Essa limitação reduz a complexidade da ferramenta de análise a ser desenvolvida. Os autores planejam explorar as opções de suporte a loops no futuro.
- **Coleção:** Um grupo de entidades relacionadas, que pode conter qualquer número de objetos de dados e workflows, além de outras coleções.
- **Metadados:** Um valor associado a um objeto de dados, atividade workflow ou coleção. Exemplos de metadados incluem dados da atualização mais recente para um objeto de dados e uma nota estruturada sobre um algoritmo usado em uma atividade.
- **Comentário:** informações de texto livre incluindo hipertexto, associadas a um objeto de dados, uma atividade, um workflow, ou uma coleção. Também chamado de anotações.
- **Proveniência** é a linhagem de objetos de dados. Traça o caminho de um objeto de dados desde a criação até todas as transformações. Toda vez que um workflow é executado, uma instância dessa execução é gerada. Essa instância representa a proveniência, que inclui os objetos de dados e os parâmetros usados como entrada para cada etapa, os objetos de dados e parâmetros gerados como saída e os relacionamentos sequenciais entre as etapas. Informações abrangentes como de onde um dado veio, como foi criado, porque e por qual atividade, são capturadas como conteúdo de proveniência.
- **Ontologia:** é uma estrutura para capturar termos usados para descrever propriedades de objetos em um domínio de pesquisa. Isso também é chamado de estruturas de vocabulário controlado ou classificação. Esse vocabulário comum permite que os cientistas de domínio expressem workflows de maneira consistente. A ontologia é geralmente representada em estruturas de árvores, onde as folhas contêm termos mais restritos, e os elementos de nível mais alto como termos mais amplos.

ARQUITETURA

MPO foi projetado para suportar uma variedade de dados e em diferentes tipos de linguagens como FORTRAN, IDL, C/C++, Python, scripts em shell, MATLAB e pode ser executado em diferentes sistemas operacionais, além de exportar resultados em diferentes formatos como json e csv.. Os blocos de construção do sistema MPO são: banco de dados, servidor de api e servidor de eventos, servidor de interface, e clientes. O core do sistema é um conjunto de servidores web: o servidor de api se comunica com o banco de dados para armazenar os dados. Um cliente pode

se comunicar com o servidor da api ou com o servidor de UI. Aqueles que se comunicam diretamente com o servidor da API são clientes “nativos”, enquanto os que se comunicam com o servidor da interface do usuário são clientes web.

- Banco de dados: O banco de dados é responsável por armazenar todas as informações persistentes. Existem varias tabelas adicionais como a tabela de usuários. A tabela que representa a estrutura do DAG é essencial para apoiar os conceitos como workflow e proveniência. Atualmente o PostgreSQL é utilizado.
- API server e Event server: O servidor da API MOP expõe seus serviços por meio da API RESTful. As entidades básicas no modelo MPO são representados com recursos RESTful correspondentes. O servidor de API utiliza o padrão MVC e foi contruido usando Flask, que é uma estrutura de aplicativo leve da web, escrito em Python. O servidor de eventos MPO é um serviço adicional executado lado a lado com o servidor de API. Ele é implementado utilizando os recursos de eventos do sistema MDSplus e fornece eventos assíncronos para utilizações em tempo real aos clientes.
- Servidor de interface interativo: O servidor de UI interativa MPO fornece visualização e navegação interativa dos dados MPO através de uma interface web, que descreve e vincula os dados do MPO e seus relacionamentos, enquanto se concentra em três principais entidades de modelo de dados: Workflow, objeto de dados e coleção.
- Evolução ontológica: É importante apoiar a evolução da terminologia e ontologia. O suporte proposto pelos autores para a evolução da ontologia toma um caminho prático, onde as mudanças que são mais prováveis de aparecer nos aplicativos reais são suportadas primeiro. Geralmente, a ontologia contém uma hierarquia de categorias. Normalmente, considera-se apenas as categorias na árvore de ontologia, em que uma categoria de nível superior contém várias categorias de nível inferior e um nó de folha contém apenas valores específicos. Alguns desses valores podem ser inteiros arbitrários ou valores de ponto flutuante, enquanto outros podem ser obtidos apenas de um subconjunto de valores de string, inteiros ou de ponto flutuante. No último caso, diz-se que os valores de uma categoria são especificados pela própria definição de ontologia. Cada valor individual neste caso é conhecido como uma instância da categoria ou um termo. Com base em nossas interações com os cientistas de aplicação, observamos que a mudança mais provável para a ontologia na ciência física é a adição de alguns termos. Isso é tipicamente criado pela introdução de um novo dispositivo experimental, uma nova técnica de coleta e análise de dados ou uma nova abordagem para estudar algum fenômeno físico. Nossa tentativa inicial de apoiar a evolução da ontologia é, portanto, adicionar instâncias de ontologia sem modificar a estrutura da árvore de ontologia. A função complementar para adição é a remoção. O trabalho está planejado para oferecer suporte à adição e remoção de categorias, renomeando e modificando categorias. Essas funções modificarão a árvore de ontologia. Propagar essas mudanças nos metadados capturados será um desafio.

ESTUDOS DE CASO

- Estudo de caso 1: Workflow EFIT: EFIT (equilibrium fitting) é uma ferramenta de simulação para o cálculo do equilíbrio magneto-hidrodinamico (MHD). Este workflow é instrumentado através do sistema de aquisição de dados e gerenciador de dados MDSplus. A equipe de desenvolvimento da MPO trabalhou com os desenvolvedores do workflow para garantir que somente as informações de alto nível fossem capturadas, o que garante que as informações apresentadas fossem um diagrama de workflow limpo.
- Estudo de caso 2: Workflow CASCADE: Cascade é um workflow para projeto de análise de dados climáticos. A execução do workflow começa com centenas de arquivos de dados, que cria centenas de ramificações idênticas do DAG, em que cada um dos ramos é essencialmente o mesmo. O estudante de pós-graduação que executou a instrumentação passou apenas algumas horas na tarefa e foi capaz de instrumentar cerca de meia dúzia de funções. O teste foi conduzido em um supercomputador chamado Edison no centro NERSC (National Energy Research Scientific Computing) localizado em Berkeley na Califórnia. Embora esse teste tenha ocorrido sem problemas, ele revela uma deficiência do sistema existente: produz muitas cópias das subárvores idênticas. Uma maneira melhor de representa-los de uma maneira mais compacta seria altamente desejável.

LIÇÕES APRENDIDAS

A partir dos testes do MPO foram notados alguns pontos a serem melhorados, como por exemplo a implementação inicial da função de filtragem, que estava demorando muito quando havia milhares de fluxos de trabalho no banco de dados MPO. Para reduzir o tempo de resposta, foram implementadas técnicas mais avançadas para processar os filtros. Em vários testes, foi descoberto que o DAG produzido pelos fluxos de trabalho é muito profundo ou muito largo para ser visualizado, como o caso do CASCADE, que tem muitas sub árvores quase idênticas. Para lidar com hierarquias profundas, os autores estão em um processo para desenvolver uma melhor maneira de recolher uma sub árvore em um super nó.

ANÁLISE SEGUNDO O LEITOR

1. Qual tipo de proveniência abordada no trabalho?
Essa informação não é explícita no texto, entretanto os autores trabalham com metadados de proveniência referentes aos resultados obtidos na execução de workflows, dessa forma, assume-se que a proveniência abordada no estudo é a retrospectiva.
2. Qual tipo de ontologia utilizada no trabalho?
Não existem informações sobre o tipo de ontologia utilizada, entretanto percebe-se que foi utilizada uma ontologia de tarefa, tomando como base a definição de Isotani e Bittencourt (2015) “a ontologia de tarefa representa os processos e atividades para resolver um determinado problema abstraindo o contexto do domínio”
3. Qual a principal vantagem em se utilizar ontologia no contexto da pesquisa?
A principal vantagem do uso de ontologias percebida no artigo é a disseminação e padronização da informação, possibilitando geração de conhecimento, uma vez que os termos do domínio que compõem a ontologia, são definidos de forma formal.
4. Questões de granularidade são abordadas no artigo?
Não. A granularidade não é abordada no artigo.

ISOTANI, Seiji; BITTENCOURT, Ig Ibert. **Dados Abertos Conectados: Em busca da Web do Conhecimento**. Novatec Editora, 2015.