

Computação em Nuvem para Ciência: o Papel Fundamental da Área de Bancos de Dados

Daniel de Oliveira¹, Marta Mattoso²

¹ Instituto de Computação - Universidade Federal Fluminense

² COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro

danielcmo@ic.uff.br, marta@cos.ufrj.br

O uso de computação em nuvem [Vaquero et al. 2009] para apoiar o desenvolvimento da ciência é um tema complexo que conta com linhas de financiamento específicas em agências de fomento de vários países. Esse apoio envolve diversas disciplinas da computação como o processamento paralelo, redes de sensores, visualização e principalmente bancos de dados. A característica principal do apoio ao desenvolvimento da ciência em larga escala passa pela gerência de fluxos de dados científicos (*i.e.* *data-flow* em *workflows*) [Taylor et al. 2007][Mattoso et al. 2010] em grande volume. Assim como os sistemas de bancos de dados surgiram para gerenciar dados, acima dos serviços básicos de gerência de arquivos do sistema operacional, os sistemas de gerência de *workflows* orientados ao fluxo de dados científicos (SGWfC) desempenham esse mesmo papel hoje. Ou seja, os SGWfC tiram partido do conhecimento do fluxo de dados para realizar um escalonamento de recursos orientado ao *workflow* científico, para gerenciar réplicas de dados, manter os dados consistentes por meio de recuperação de falhas, gerir o acesso concorrente, dentre outros.

A área de Bancos de Dados vem usando seus fundamentos para gerenciar grandes conjuntos de dados ao longo de décadas, usando, por exemplo, processamento paralelo e distribuído. Um exemplo é a otimização do *workflow*. Assim como a álgebra relacional possibilita a otimização do plano de execução de uma consulta, uma álgebra voltada ao fluxo de dados do *workflow* científico [Ogasawara et al. 2011] também pode ser usada para otimizar o plano de execução de um *workflow* orientado a dados. Usar um SGBD tradicional para dados científicos não é a solução, uma vez que SGBDs são voltados para dados da área de negócios. Por outro lado, ignorar as contribuições de fundamentos de bancos de dados na gerência de fluxos de dados e criar soluções visando apenas à eficiência da programação funcional (*e.g.* o modelo Map-Reduce) ou ao escalonamento de recursos no nível de infraestrutura de nuvem, pode levar a soluções limitadas ou a redescobrir algoritmos e tecnologias. A execução de *workflows* em nuvens de computadores apresenta vários desafios. Por exemplo, como os próprios cientistas executam os *workflows*, é difícil decidir *a priori* a quantidade de recursos e por quanto tempo os mesmos serão necessários ou como distribuir as tarefas nas diversas máquinas virtuais durante a execução do *workflow*. Usar serviços de nuvens que desconhecem a natureza do fluxo de dados de *workflows* científicos pode levar ao uso inadequado dos recursos.

Além da gerência da execução paralela, os cientistas têm de gerenciar outras questões, como a captura de proveniência [Freire et al. 2008] distribuída de forma a garantir a validade, reprodutibilidade e a análise do *workflow*. Os resultados de um *workflow* científico devem ser passíveis de reprodução para serem considerados válidos cientificamente. Tal reprodução é fortemente baseada no uso de dados de proveniência. A proveniência lida com os dados históricos do *workflow*, sejam eles relativos à sua estrutura (*i.e.* prospectiva) ou a sua execução (*i.e.* retrospectiva). Além de apoiar a reprodução, os dados de proveniência podem oferecer subsídios para resolver muitos dos problemas em aberto na execução de *workflows* em nuvens de computadores como o escalonamento de atividades, tolerância

a falhas e monitoramento [Oliveira et al. 2012]. Como esses dados de proveniência podem ser representados de diferentes formas (modelo relacional, XML, grafo, etc.) que são usualmente apoiadas por SGBD, podemos nos beneficiar de técnicas de banco de dados já existentes. Além disso, a utilização da proveniência no apoio à gerência deste tipo de experimento nos traz novas oportunidades na área de banco de dados, seja na representação e captura dos dados, na otimização da consulta submetida pelo cientista, na fragmentação dos dados científicos e de proveniência, etc.

Nesse tutorial, abordamos como fundamentos de bancos de dados podem ser usados no processamento de dados científicos em sintonia com os SGWfC em nuvens de computadores. Consideramos que essa combinação está no caminho crítico do apoio ao desenvolvimento de ciência em larga escala em nuvens computacionais. Mostraremos um panorama do estado da arte no uso da computação em nuvem para apoiar o desenvolvimento da ciência computacional. Apresentaremos as soluções principais nesse apoio em nuvens, a saber, Pegasus [Deelman et al. 2004], Swift [Wilde et al. 2009], Tavaxy [Abouelhoda et al. 2012], Nephela [Warneke and Kao 2009] e SciCumulus [Oliveira et al. 2010], destacando suas principais contribuições como infraestrutura. Discutiremos as oportunidades de pesquisas em bancos de dados quanto à gerência de dados e processos científicos, aos aspectos de distribuição de dados e atividades dos *workflows*, ao acompanhamento da execução de longa duração por parte do cientista, à gerência de dados de proveniência e à combinação de dados de proveniência com dados científicos do domínio da aplicação.

REFERENCES

- ABOUEHODA, M., ISSA, S., AND GHANEM, M. Tavaxy: Integrating Taverna and Galaxy workflows with cloud computing support. *BMC Bioinformatics* 13 (77): 1–19, 2012.
- DEELMAN, E., BLYTHE, J., GIL, Y., KESSELMAN, C., MEHTA, G., PATIL, S., SU, M.-H., VAHI, K., AND LIVNY, M. Pegasus : Mapping Scientific Workflows onto the Grid. In *Proceedings of the Across Grids Conference*, 2004.
- FREIRE, J., KOOP, D., SANTOS, E., AND SILVA, C. Provenance for Computational Tasks: A Survey. *Computing in Science and Engineering* 10 (3): 11–21, 2008.
- MATTOSO, M., WERNER, C., TRAVASSOS, G. H., BRAGANHOLO, V., MURTA, L., OGASAWARA, E., DE OLIVEIRA, D., CRUZ, S. M. S., AND MARTINHO, W. Towards Supporting the Life Cycle of Large-scale Scientific Experiments. *International Journal of Business Process Integration and Management* 5 (1): 79–92, 2010.
- OGASAWARA, E., DIAS, J., DE OLIVEIRA, D., PORTO, F., VALDURIEZ, P., AND MATTOSO, M. An Algebraic Approach for Data-Centric Scientific Workflows. *Proceedings of the International Conference on Very Large Data Bases* 4 (1): 1328–1339, 2011.
- OLIVEIRA, D., OCANA, K., BAIAO, F., AND MATTOSO, M. A Provenance-based Adaptive Scheduling Heuristic for Parallel Scientific Workflows in Clouds. *Journal of Grid Computing* 10 (1): 521–552, 2012.
- OLIVEIRA, D., OGASAWARA, E., BAIAO, F., AND MATTOSO, M. SciCumulus: A Lightweight Cloud Middleware to Explore Many Task Computing Paradigm in Scientific Workflows. In *Proceedings of the 2010 IEEE Cloud Computing Conference*, 2010.
- TAYLOR, I., DEELMAN, E., GANNON, D., AND SHIELDS, M. *Workflows for e-Science: Scientific Workflows for Grids*. Springer Verlag, 2007.
- Vaquero, L. M., RODERO-MERINO, L., CACERES, J., AND LINDNER, M. A break in the clouds: towards a cloud definition. *SIGCOMM Comput. Commun.* 39 (1): 50–55, 2009.
- WARNEKE, D. AND KAO, O. Nephela: Efficient Parallel Data Processing in the Cloud. In *Proceedings of the Many Task Computing Workshop*, 2009.
- WILDE, M., HATEGAN, M., WOZNAK, J., CLIFFORD, B., KATZ, D., AND FOSTER, I. Swift: A language for distributed parallel scripting. *Parallel Computing* 1 (1): 633–652, 2009.