



Análisis y Sintonización de Aplicaciones Paralelas/Distribuidas de Bioinformática: mpiBLAST.

Claudia Rosas-Mendoza

2008-2009

Directora:
Dra. Anna Morajko.

Contenido.

Introducción

- Motivación
- Bioinformática y mpiBLAST
- Ineficiencias en Paralelismo

Análisis de Rendimiento

- Proceso de Análisis de Rendimiento

Experimentos

- Entorno con mpiBLAST
- Resultados

Conclusiones

- Conclusiones Obtenidas
- Líneas Abiertas

Contenido.

Introducción

- Motivación
- Bioinformática y mpiBLAST
- Ineficiencias en Paralelismo

Análisis de Rendimiento

- Proceso de Análisis de Rendimiento

Experimentos

- Entorno con mpiBLAST
- Resultados

Conclusiones

- Conclusiones Obtenidas
- Líneas Abiertas

Motivación.

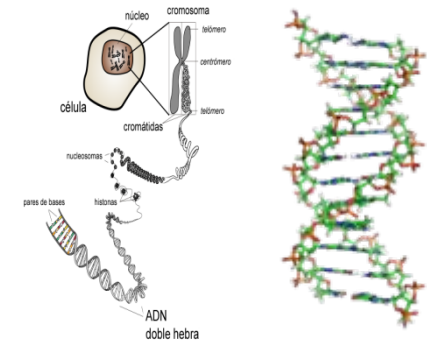
- ▶ Auge de las aplicaciones científicas paralelas.
- ▶ Mayor cantidad de datos, lo que exige mayor necesidad de cómputo.
- ▶ Problemas de ineficiencia latentes al introducir el paralelismo.
- ▶ El usuario busca un mejor uso de los recursos disponibles.
- ▶ La Bioinformática comienza a acudir a Cómputo de Altas Prestaciones.



Análisis de Prestaciones Básico. R. Jain

Bioinformática y mpiBLAST.

Las secuencias biológicas son tratadas como cadenas de caracteres.

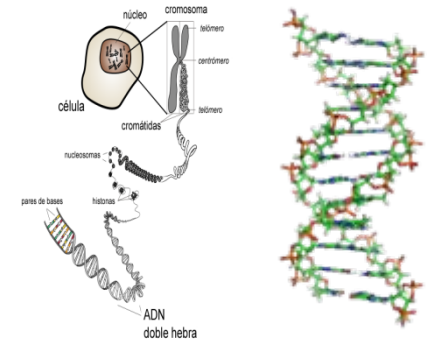


```
e.crysantemi - WordPad
Archivo Edición Ver Insertar Formato Ayuda

|>ECH3937_v3_14491:
GTGATTGTGGGGCTTTCTCAAATTAATTGTGGGGCTTTTCCCGGTTGCAGGTTCAAAGCTGCCATTGCAACCGGTGTT
TTCGGCGCTCACCGCCCCGAAAACCAATAACTGA
>ECH3937_v3_14492:
GTGCCGGATTTTATCGCCATGCGCCTTCAGCGGAGAATTTTTTGCATGGCACAGCGTTTCAGAAAAATAGACTAATTCAGGA
GTGTTATACTGATGATAAGAAAAATGTTGATAGCACTAACAGGCAAAACCATAGGTATAAATTATCAATTTTTGCTATATC
AATAG
>ECH3937_v3_14493:
TTGAGATGTGAGGTGCCGGACATGTTCCCGTTTCAGAGCCTGGTTGCAGACGCAGATTGATGACTACCGCGGGCAGTTGCG
TAATGCCACGATGGAGTTTTATCTGCGCGAGTTATCGCTGGAGCGGGATGACGGCGAGATTGGCGAATTGCGGCACTACT
ACCTGACCGGTTGTGCAAAATGGCGGAAGTGCAGCCAAACAGCAGGGCGGACGAAAACAGTTACCTGTTTCAGCCTGATCAAGATC
CACCAGCATCTGATTTCATGAAATCAACAATACCGAGCGCGACCACTTATTCGGGTGCAGAGTTACTACTTTGCAAGCCA
GACGTTGCAGCACATTTGCAACCCAGTTTCAGCCTGATGGGTAATTGGGACAAAGCCACCGCCTTCCAAACCGATTTTATGC
AGCGGGTGGCTTTTATCCCTGA
>ECH3937_v3_14494:
GTGATGCTGTGGAAACGTAGCTAGATATTGAGCAGTTGAACAGATGGCGGTGCGAGCGCATGGCGGGCATATCGGCAT
CCGATGACGCGCCTGACCGACGACACGCTGGAAGGCGTGATGCCGGTGGATCATCGCACGCGTCAGCCTTTCCGGCTGC
TGATGGCGGCGCATCGGTAGCGCTGGCGGAATCGCTGGGGTCGATCGCCGGTTATCTGTGTTGGAAGGCGAGCAGCGG
GTGGTGGGGGTAGAAATCAACGCCAACCACTGCGCGCGGTGACGGAAGGCGAGGTGCGCGGCGTGTGCGCGCGCTGCA
CACCGGCAACGGATGCGAGTCTGGCAAAATTGATATTTTTGACAGCGGTGACCGGCTCTGTTGCACTCACGCTTGACCA
CGCGGTGATCACGCCGATGCCTGA
>ECH3937_v3_14495:
GTGCTGAGCTTTTGGAAAGCCTTGAAGCAAAATGGTTTTACCGGCGATATCGCCACCCAGTACGCCGATCGCGTACGAT
GGCGACGGATAACAGTATTTATCAACTGCTGCCGGACGCGGTGGTTTTCCCGGTTCTACCGCGCAGTGGCGCTGTTGG
CCCGGTTGGCGGATGAGGATCGCTTTTCGCGAGCTGGTTCTTACGCGCGCGCGCGCGGCGCACCGGCAACCGGCAAGGCG
CTCAATCACGGGATTGTGGTGGATATGTCGCTACATGAACCGTATTTTGGAAATCAACCGGAGCAGGGTTGGGTACG
GGTGGAAAGCGGGGTCATCAAGGATCAACTGAACAGTACCTGAAGCGGTCGCGCTACTTTTTGCGCGGAGTTGTCCA
CCAGTAACCGCGCCACGCTGGGCGGATGATCAATACCGAGCGTTGCGGGCAGGGCTCGCTGGTGTACGGCAAAACCTCG
GACCATGTCTGGGGCTGCGCGCGGTGTTGCCGGCGGTGAACTGCTGGATACTAGCGGATGCGGTTGGCGCTGGCGGA
```


Bioinformática y mpiBLAST.

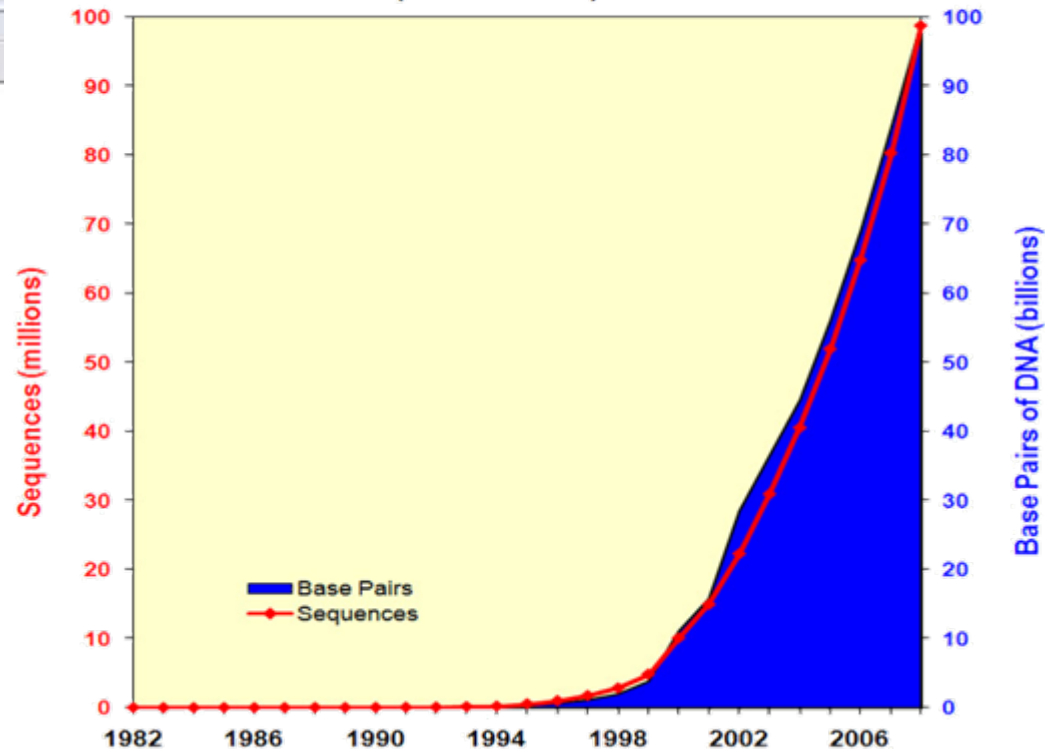
Las bases de datos de secuencias biológicas crecen exponencialmente.



```
e.crysantemi - WordPad
Archivo Edición Ver Insertar Formato Ayuda

>ECH3937_v3_14491:
GTGATTGTGGGGCTTTCTCAAATTAATTGTGGGGCTTTTCCCGGTTGCAGGTTCAAAGCTGCCATTGCAACCGGTGTT
TTCGGCGCTCACCGCCCCGAAACCAATAACTGA
>ECH3937_v3_14492:
GTGCGCGATTATCGCCATCGCGCTTCAGCGGAGAATTTTTTGCATGGCACAGCGTTTCAGAAAAATAGACTAATTCAGGA
GTGTTATACTGTATGATAAGAAAATGTTGATAGCACTAACAGGCAAAACCATAGGTATAAATTATCAATTTTGTCTATATC
AATAG
>ECH3937_v3_14493:
TTGAGATGTGAGGTGCCGGACATGTTCCCGTTTCAGAGCCTGGTTGCAGACGCAGATTGATGACTACCGCGGCGAGTTGCG
TAATGCCACGATGGAGTTTATCTGGCGGAGTTATCGCTGGAGCGGGATGACCGCGAGATTGGCGAATTGCGGCACTACT
ACCTGACCGGTTGTGCAAAATGGCGGAAGTTCAGCCAAACAGCAGGCGGACGAAAACAGTTACCTGTTTCAGCGCTGATCAAGATC
CACCAGCATCTGATTATGAAATCAACAATACCGAGCGGACCACTTATTCGGGTTGCAGAGTTACTACTTTGCAAGCCA
GACGTTGCAGCACATTTCGACCCAGTTTCAGCCTGATGGGTAATTGGGACAAAGCCACCGCCTTCCAAACCGATTATTCG
AGCGGGTGGCTTTTATCCCGCTGA
>ECH3937_v3_14494:
GTGATGCTGTGGAAACGTAGCTAGATATTGAGCAGTTGAAACAGATGGCGGTTCGACGGCATGGCGGGCATATCGGCAT
CCGTATGACGCGCTGACCGACGACACGCTGGAAGCGGTGATGCGCGTGGATCATCGCACGCGTCAGCCTTTTCGGGCTGC
TGCATGGCGGCGCATCGGTAGCGCTGGCGGAATCGCTGGGGTGCATCGCGGTTATCTGTGTTGGAAGGCGAGCAGCGG
GTGGTGGGGGTAGAAATCAACGCCAACCACTGCGCGCGGTGACGGAAGGCGAGGTGCGCGCGGTGTCGCGCGCGTGCAC
CACCAGCAACCGGATGCGAGGCTGCGCAAAATTGATATTTTGACAGCGCTGACCGGCTCTGTTGCACTCAGCCTTGACCA
CGCGGCTGATCAGCGCGATGCCTGA
>ECH3937_v3_14495:
GTGCTGAGCTTTTGGAAAGCCTTGAAGCAAAATGGTTTTACCGGCGATATCGCCACCCAGTACCGCGATCGCGCTGACGAT
GGCGACGGATAACAGTATTTATCAACTGCTGCCGGACGCGGTGTTTTCCCGGTTCTACCGCGCAGCTGGCGCTGTTGG
CCCGGTTTGGCGGATGAGGATCGCTTTTCGCGAGCTGGTTTTCACGCGCGCGCGCGCGGACCGGCAACCAACGGGCAAGCG
CTCAATCACGGGATTGTGGTGGATATGTCGCTACATGAACCGTATTTTGGAAATCAACCGGAGCAGGGTTGGGTACG
GGTGGAAAGCGGGGTCATCAAGGATCAACTGAACAGTACCTGAAGCGGTTTCGGCTACTTTTTGCGCGGAGTTGTCCA
CCAGTAACCGCGCCACGCTGGCGCGGATGATCAATACCGACGCTTCGGGGCAGGGCTCGCTGGTGTACGGCAAAACCTCG
GACCATGTCTGGGGCTGCGCGCGGTGTTGCCGGCGGTGAACCTGCTGGATACTAGCGGATGCGGCTGGCGCTGGCGGA
```

Growth of GenBank
(1982 - 2008)



<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/genbankstats.html>

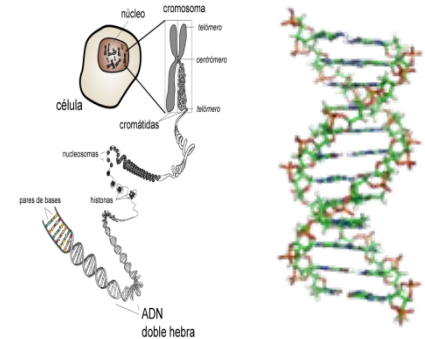
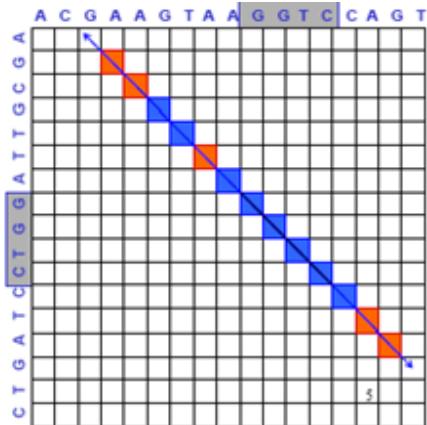
Revisado: Febrero 3, 2009

Bioinformática y mpiBLAST.

Para mantener el significado biológico dentro de la comparación, es necesario considerar la totalidad de las cadenas sin fragmentarlas.

- $w = 4$
- Exact keyword match of **GGTC**
- Extend diagonals with mismatches until score is under 50%
- Output result
GTAAGGTCC
GTTAGGTCC

From lectures by Serafim Batzoglou (Stanford)



Growth of GenBank
(1982 - 2008)



<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/genbankstats.html>

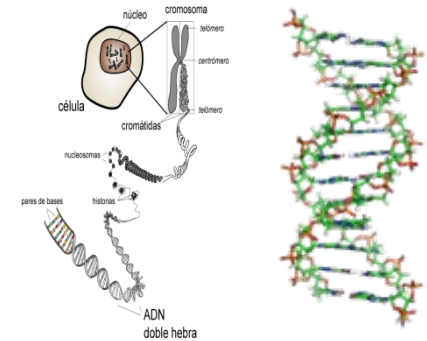
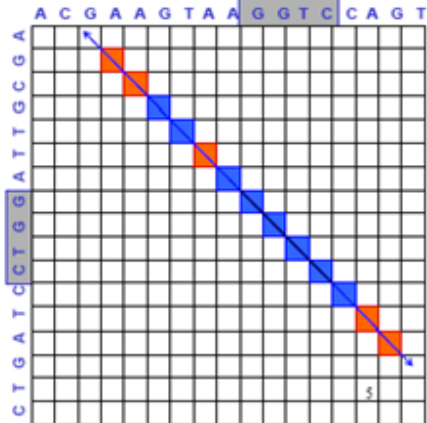
Revisado: Febrero 3, 2009

Bioinformática y mpiBLAST.

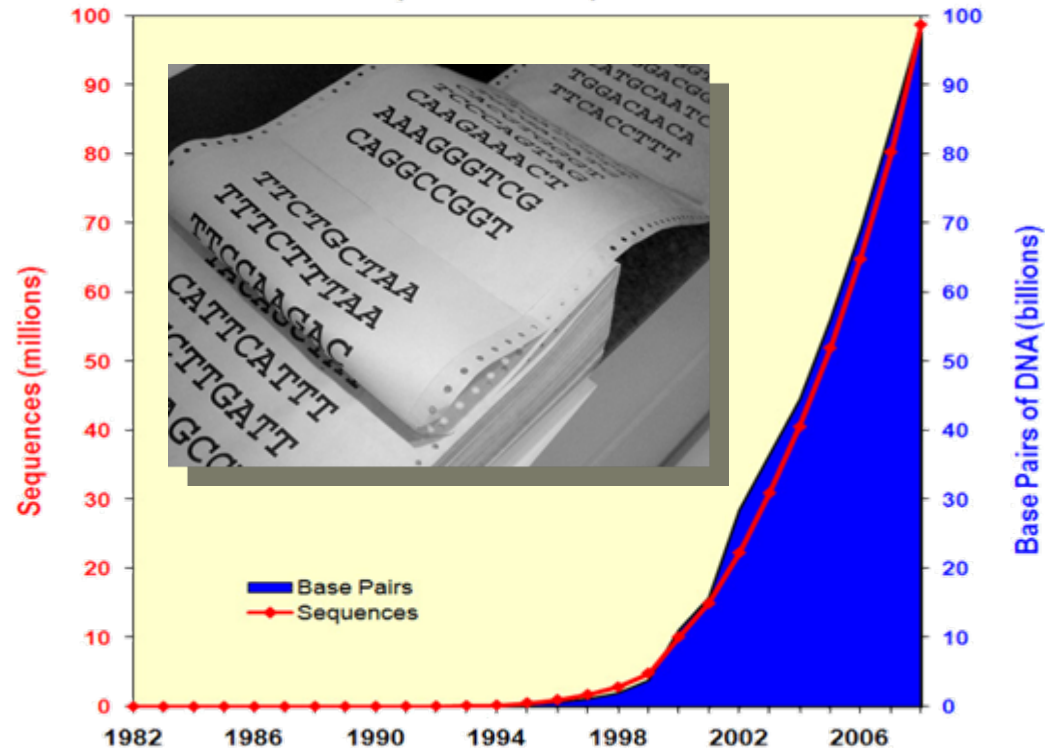
Para mantener el significado biológico dentro de la comparación, es necesario considerar la totalidad de las cadenas sin fragmentarlas.

- $w = 4$
- Exact keyword match of **GGTC**
- Extend diagonals with mismatches until score is under 50%
- Output result
GTAAGGTCC
GTTAGGTCC

From lectures by Serafim Batzoglou (Stanford)



Growth of GenBank
(1982 - 2008)

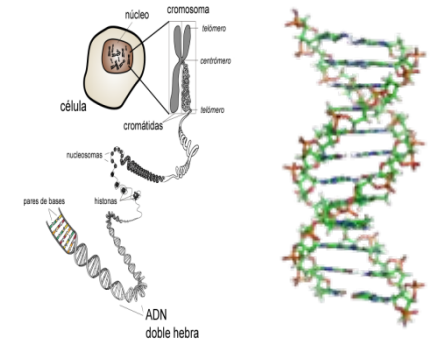


<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/genbankstats.html>

Revisado: Febrero 3, 2009

Bioinformática y mpiBLAST.

Buscando ejecuciones para
mpiBLAST en el menor tiempo
posible.

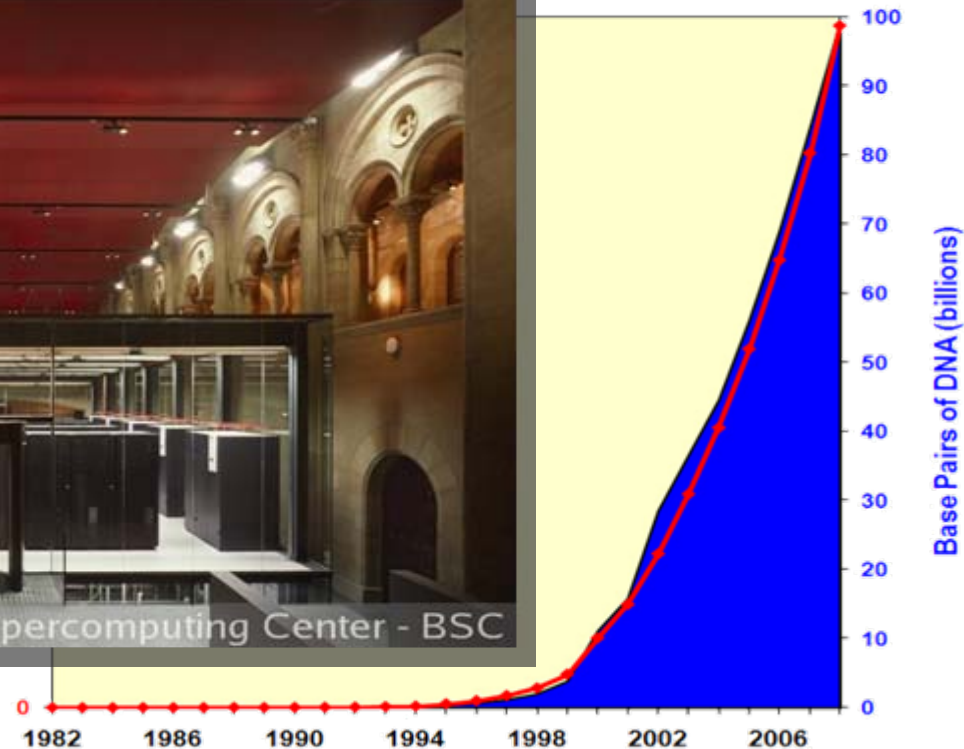


- $w = 4$
- Exact keyword match of **GGTC**
- Extend diagonals with mismatches until score is under 50%
- Output result
GTAAGGTCC
GTTAGGTCC

From lectures by Serafim Batzoglou
(Stanford)



GenBank

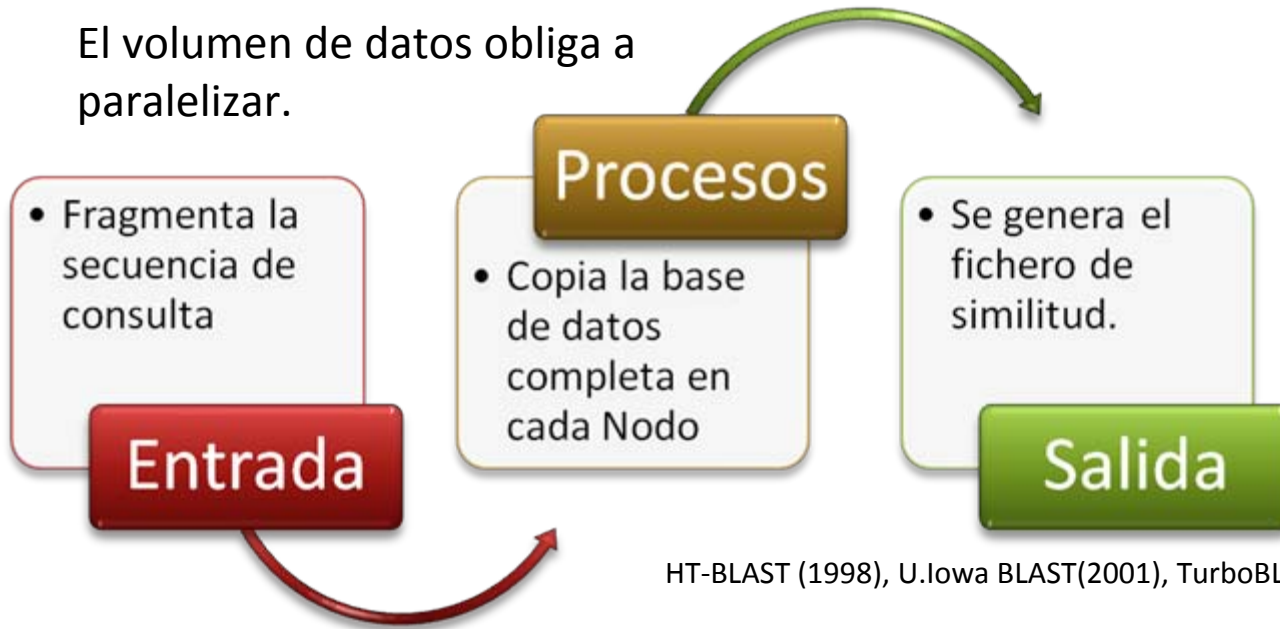


<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/genbankstats.html>

Revisado: Febrero 3, 2009

Problemas de Paralelismo.

El volumen de datos obliga a paralelizar.



HT-BLAST (1998), U.Iowa BLAST(2001), TurboBLAST (2002).

Problemas de Paralelismo.



mpiBLAST (2003).

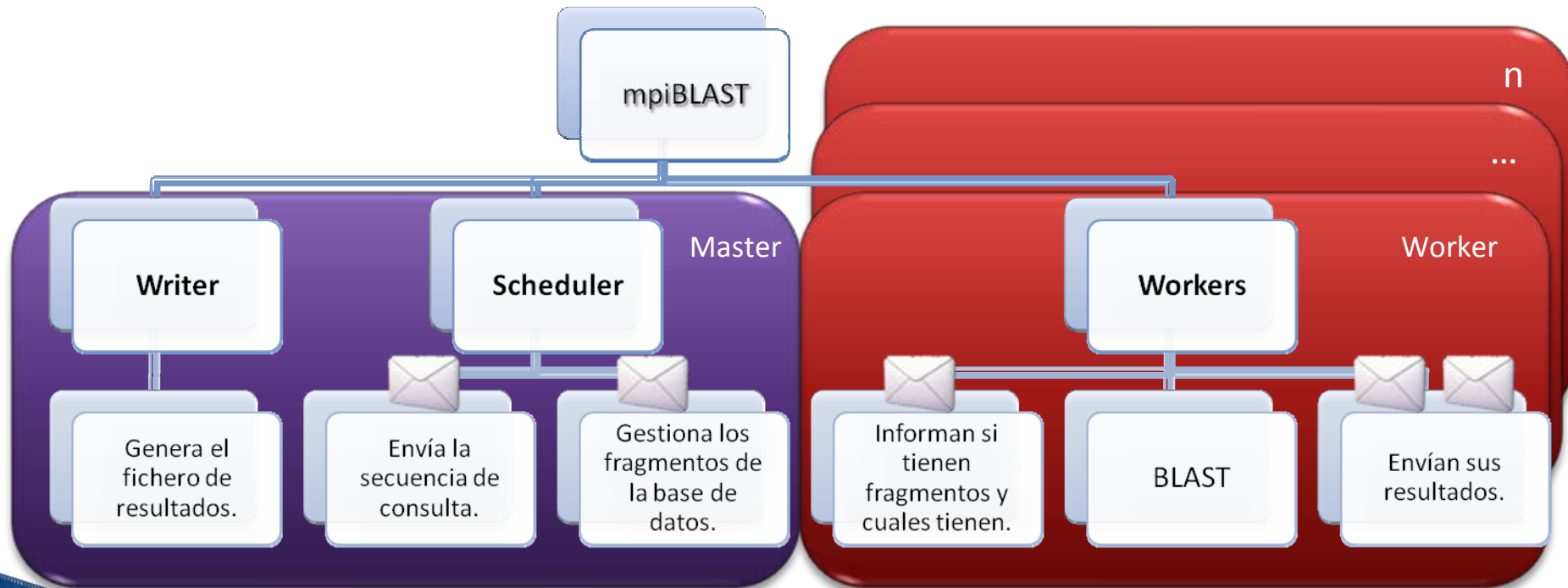
Trayendo consigo ineficiencias en las que no se saca provecho del total de la capacidad de paralelismo del entorno sobre el que se ejecuta.

Algoritmo de mpiBLAST.

Es la paralelización de BLAST (Basic Local Alignment Sequence Tool, 1990) empleando MPI, que:

- Posee un enfoque heurístico.
- Realiza alineamientos “locales”.
- Es una evolución del algoritmo de Smith-Waterman (Programación Dinámica).

Está diseñada bajo una estructura Máster-Worker con un paradigma *Embarrassingly Parallel*.





Objetivo.

Identificar los parámetros de rendimiento que están significativamente relacionados con el rendimiento global en tiempo de ejecución de la aplicación paralela bioinformática mpiBLAST y modelar la sintonización adecuada para obtener el mejor desempeño dentro de un entorno paralelo específico.

Contenido.

Introducción

- Motivación
- Bioinformática y mpiBLAST
- Ineficiencias en Paralelismo

Análisis de Rendimiento

- Proceso de Análisis de Rendimiento

Experimentos

- Entorno con mpiBLAST
- Resultados

Conclusiones

- Conclusiones Obtenidas
- Líneas Abiertas

Análisis de Rendimiento.

Se realiza con la intención de:

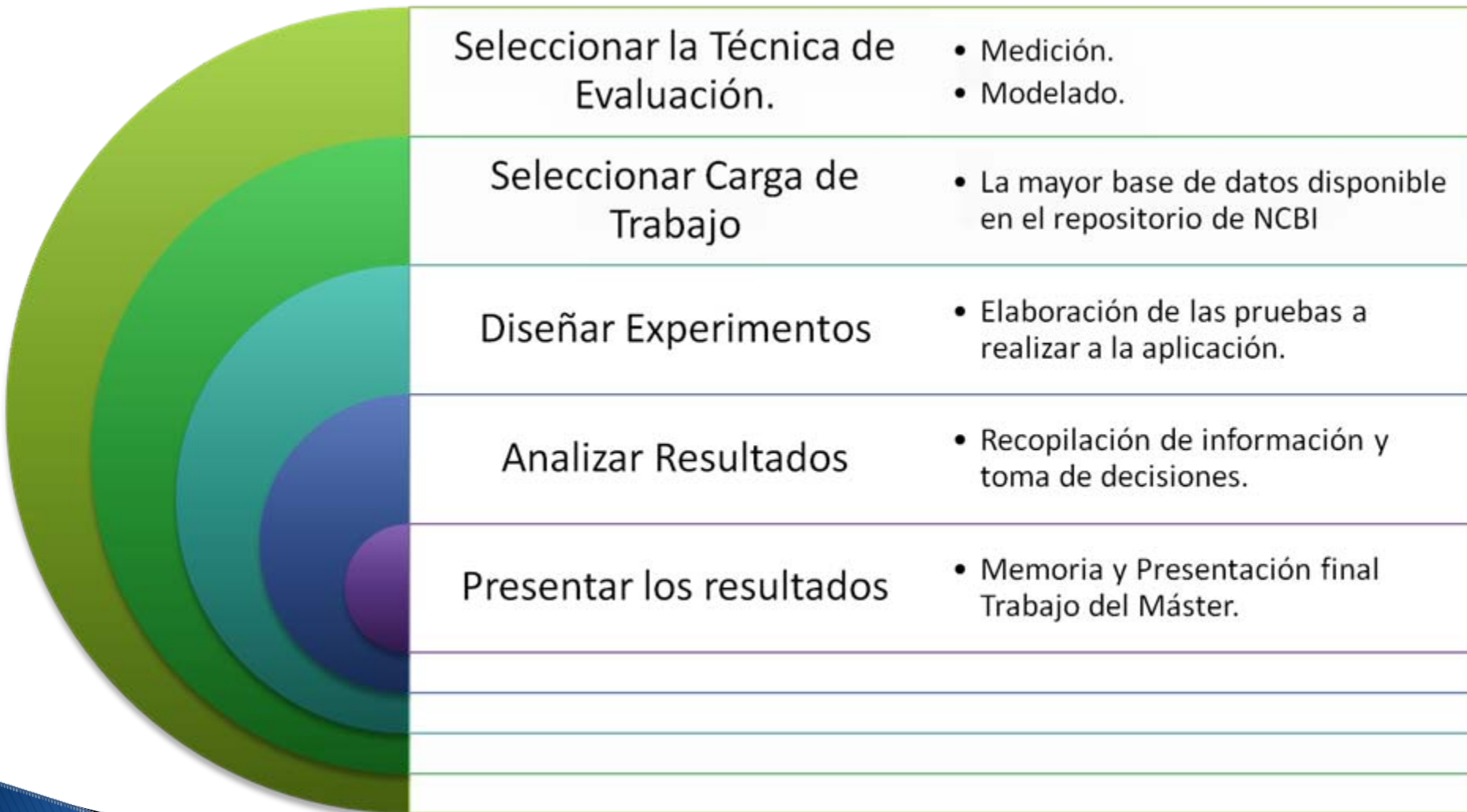
- Identificar las ineficiencias.
- Seleccionar los puntos modificables.
- Realizar sintonización.
- Obtener mejores rendimientos en las ejecuciones.



Proceso de Análisis de Rendimiento I.

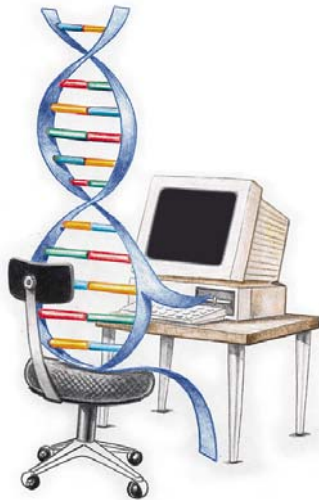


Proceso de Análisis de Rendimiento II.



Factores de Estudio.

Para el análisis de rendimiento hemos seleccionado los siguientes factores.



Tamaño de la Carga de Trabajo

Número de Workers Disponibles

Cantidad de Memoria Disponible

Granularidad de la Carga de Trabajo

Contenido.

Introducción

- Motivación
- Bioinformática y mpiBLAST
- Ineficiencias en Paralelismo

Análisis de Rendimiento

- Proceso de Análisis de Rendimiento

Experimentos

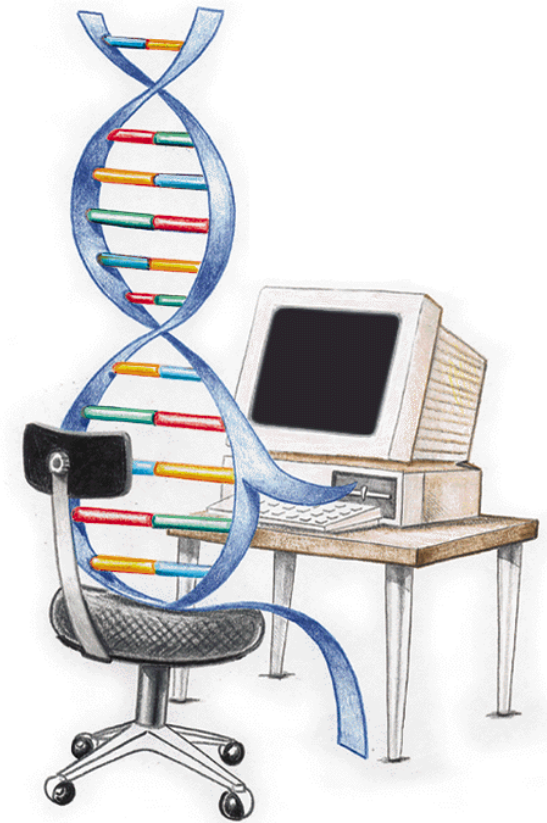
- Entorno con mpiBLAST
- Resultados

Conclusiones

- Conclusiones Obtenidas
- Líneas Abiertas

Entorno con mpiBLAST

Especificaciones Técnicas	Datos de Entrada	Objetivo
Cluster Beowulf - 32 nodos Intel® Pentium® 4 HT @3.00GHz - 1GB DRAM. - 80 GB disco SATA. - Gigabit Ethernet. - Sistema de Ficheros NFS	-Base de Datos Biológica NT, ≈26GB. - Cadenas de tamaño variable tomadas de la secuencia <i>e_chrysantem.fas</i> .	Identificar el nivel de influencia de determinados factores en el rendimiento de mpiBLAST.



Paralelismo de mpiBLAST

“Existe un límite del tamaño de la base de datos en que mpiBLAST no explota el paralelismo”

- Ejecución serie (BLAST) vs. Ejecución con 3, 4, 8, 16, 32 procesadores; con las bases de datos*:

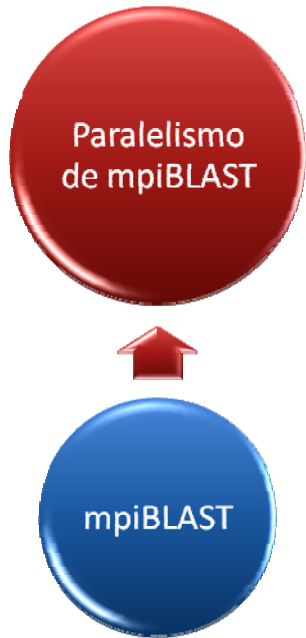
• <i>mito.nt</i>	934 KB
• <i>yeast.nt</i>	3.635,20 KB
• <i>drosoph.nt</i>	33.280,00 KB
• <i>NT</i>	7.130.316,80 KB.

Clúster DELL. (BLAST)

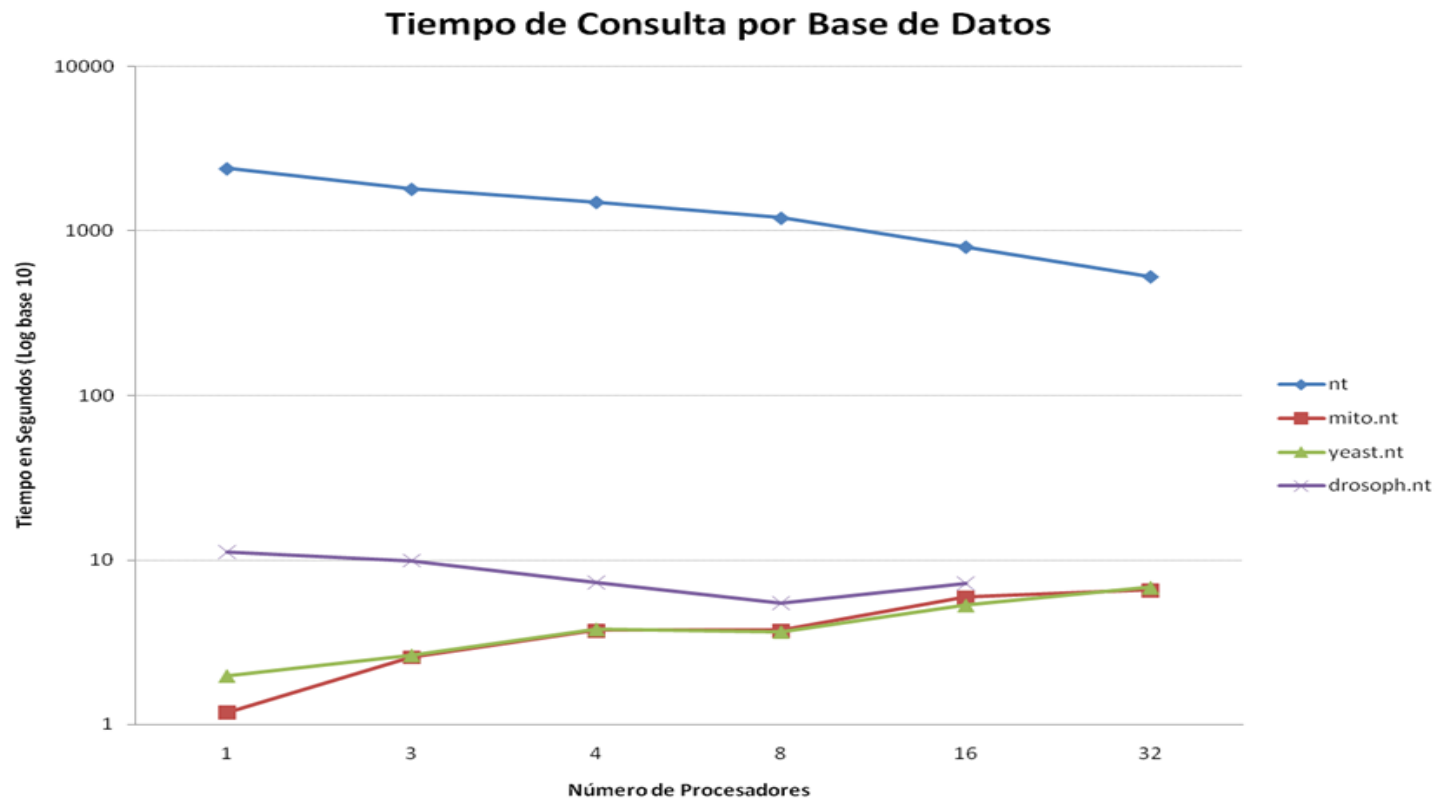
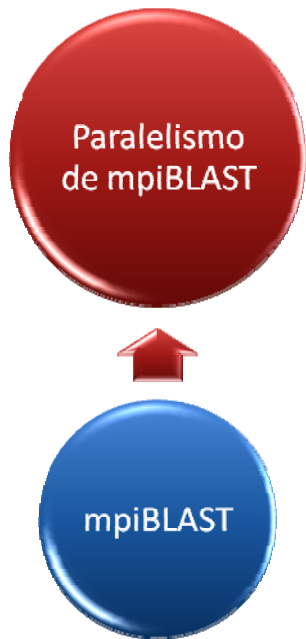
- 4 Nodos. 2 Quadcore Intel Xeon E5430 @ 2.66 Ghz.
- 12 GB RAM.

Clúster Producción. (mpiBLAST)

- Beowulf
- 32 nodos Intel® Pentium® 4 HT @3.00GHz
- 1GB DRAM.



Paralelismo de mpiBLAST



Nº de No- dos	mito.nt (sg)	yeast.nt (sg)	drosoph.nt (sg)	NT (sg)
8	4,10	3,65	5,76	627,09
32	6,56	6,82	36,10	465,74

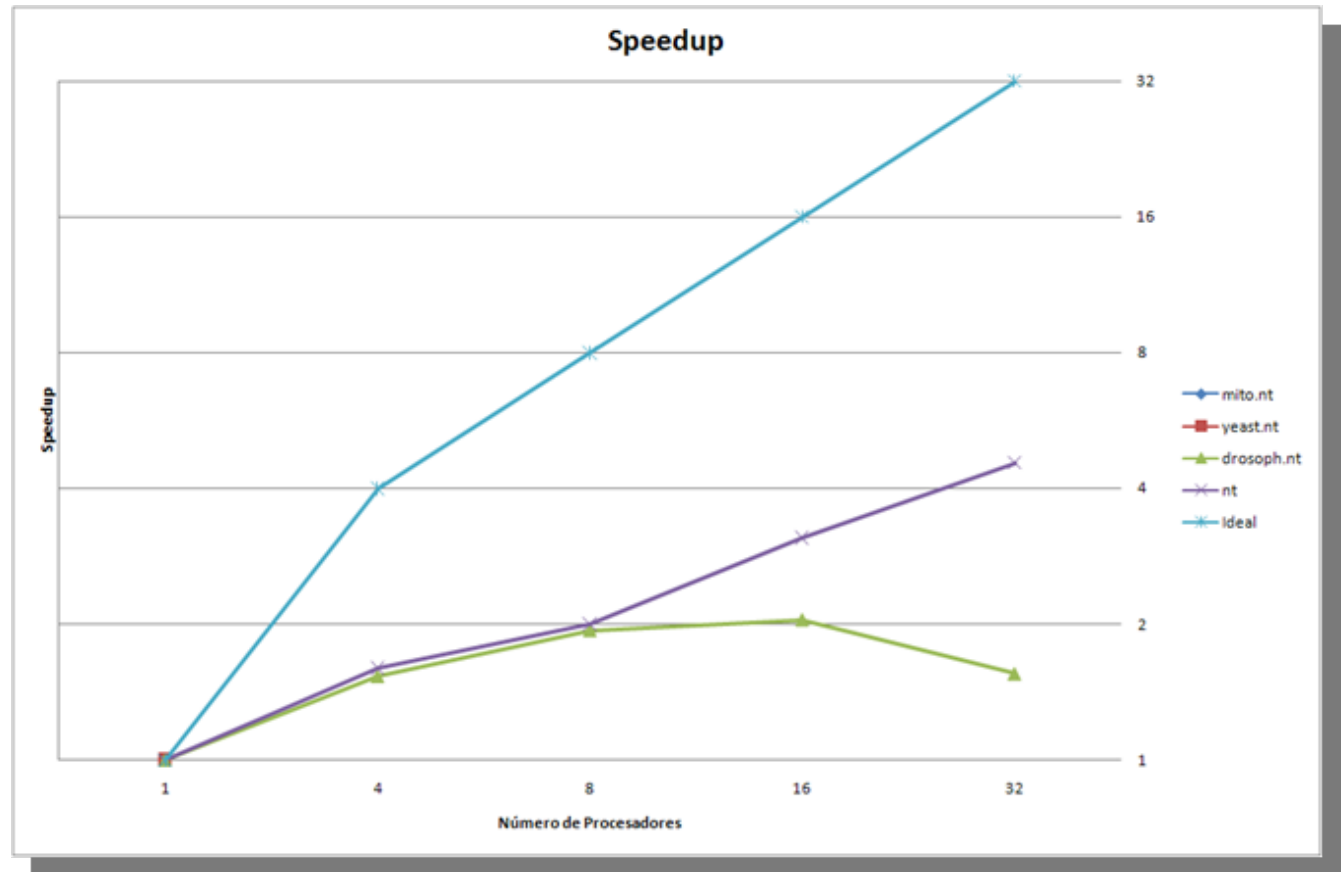
* Ficheros comprimidos bajo extensión .gz

Paralelismo de mpiBLAST

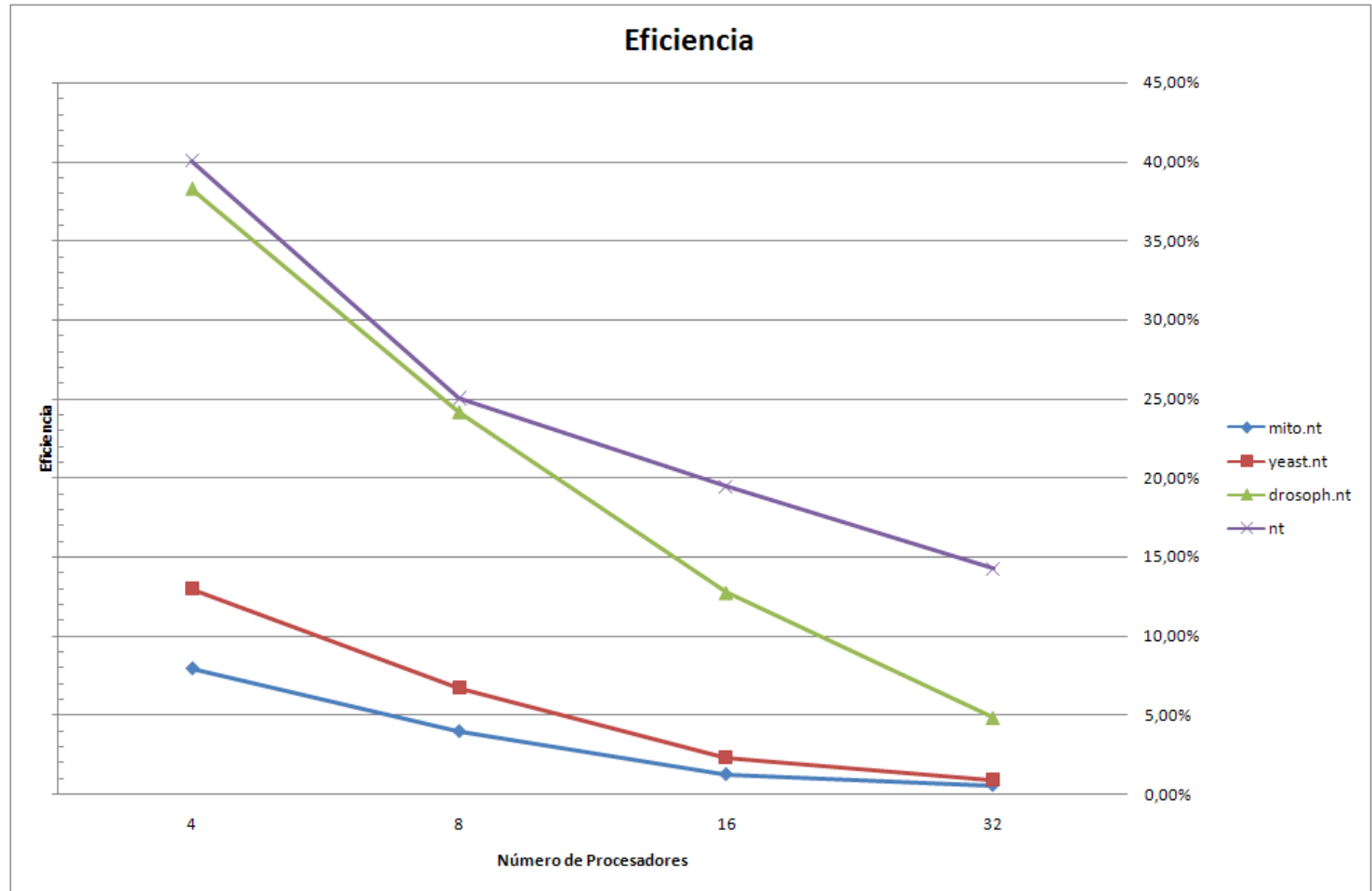
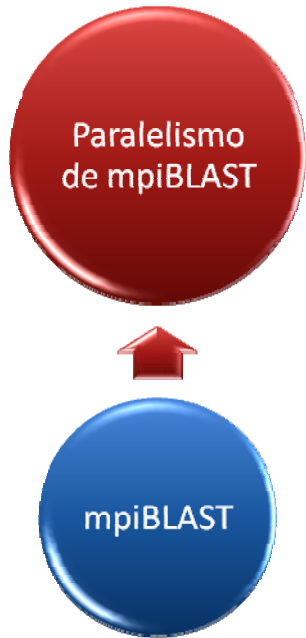
Paralelismo
de mpiBLAST



mpiBLAST



Paralelismo de mpiBLAST



Fases de mpiBLAST

“mpiBLAST esta desaprovechando el paralelismo dentro de su diseño.”

- Ejecución con 8 y 32 procesadores; con la base de datos:
 - NT 7.130.316,80 KB.

Clúster Desarrollo (8 Procesadores)

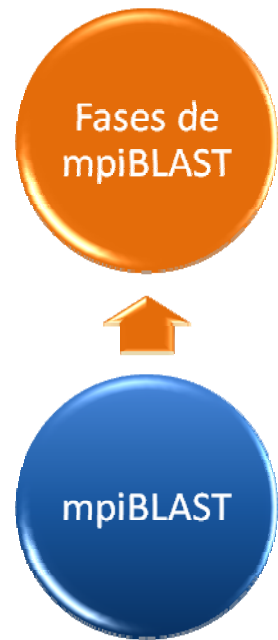
Beowulf

- 8 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.

Clúster Producción (32 Procesadores).

Beowulf

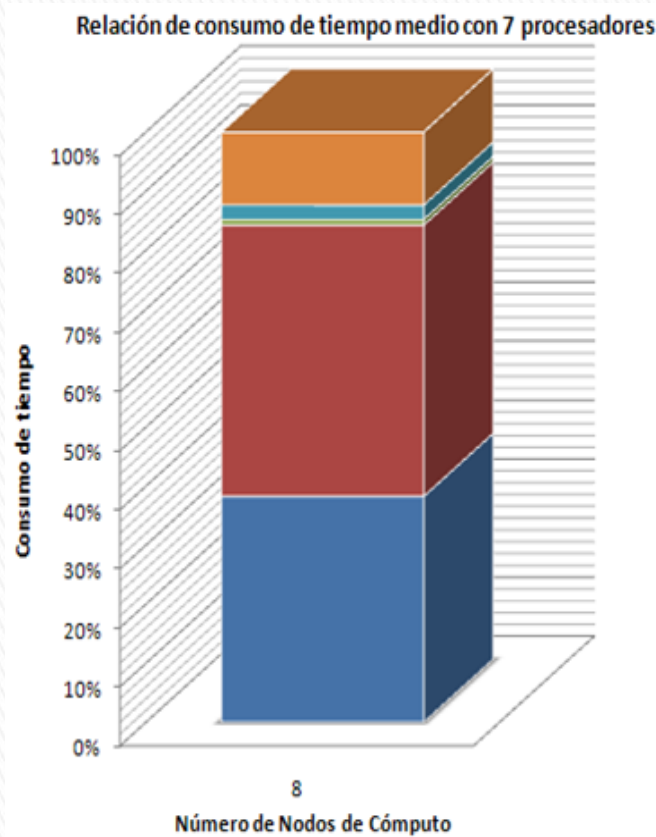
- 32 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.



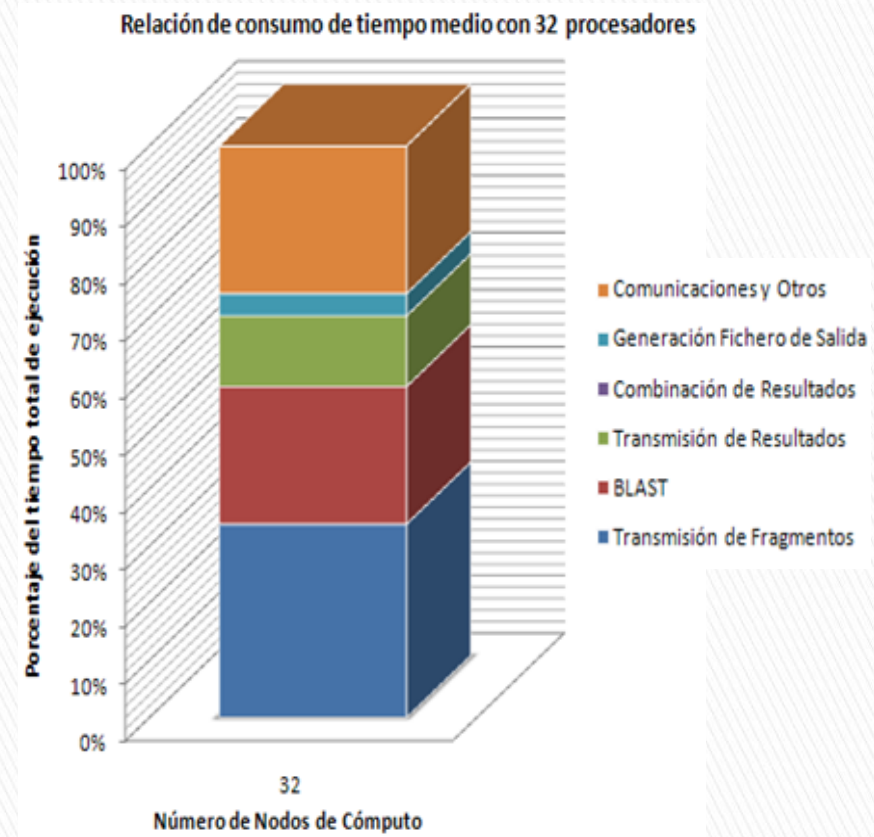
Fases de mpiBLAST

Fases de
mpiBLAST

mpiBLAST



8 Nodos de Cómputo

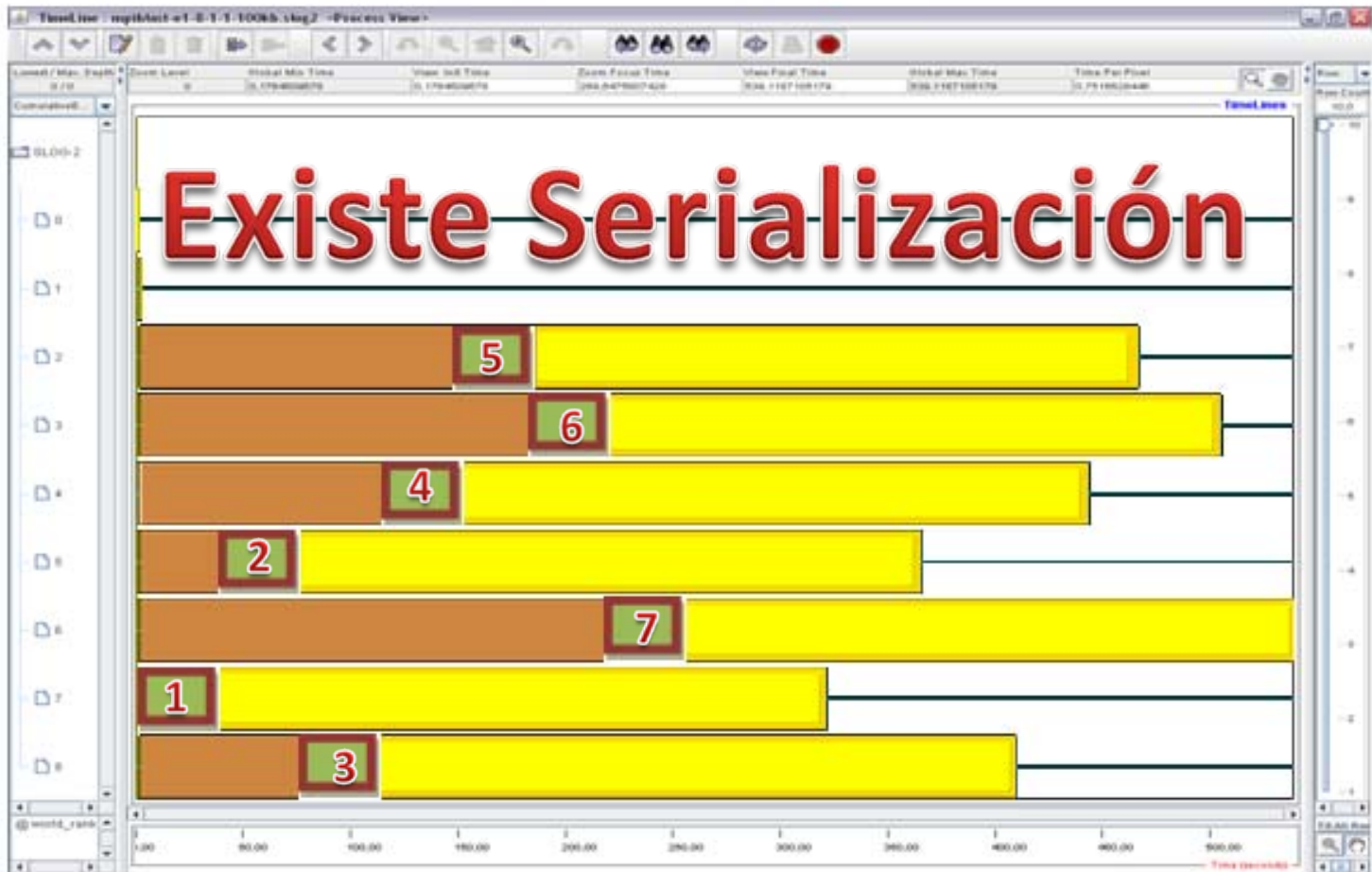


32 Nodos de Cómputo

Fases de mpiBLAST

Fases de
mpiBLAST

mpiBLAST



Rendimiento de memoria con mpiBLAST

“La cantidad de memoria disponible restringe el desempeño de mpiBLAST”.

- Ejecución con 8 y 32 procesadores; con la base de datos:
 - NT 7.130.316,80 KB.

Clúster Desarrollo (8 Procesadores)

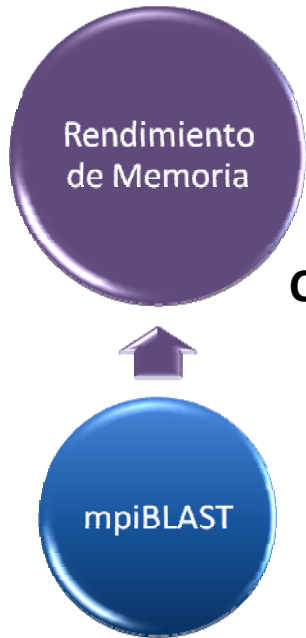
Beowulf

- 8 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.

Clúster Producción (32 Procesadores).

Beowulf

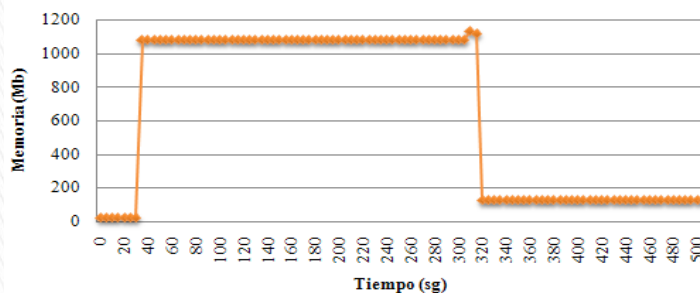
- 32 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.



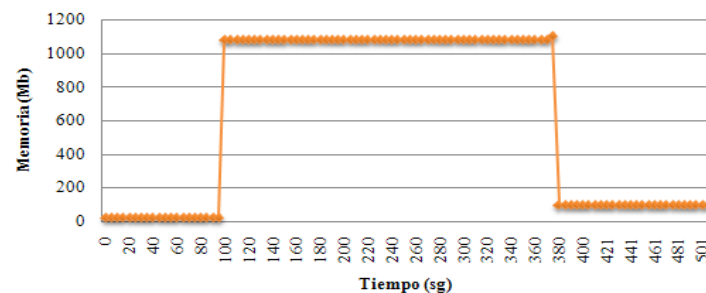
Rendimiento
de Memoria

mpiBLAST

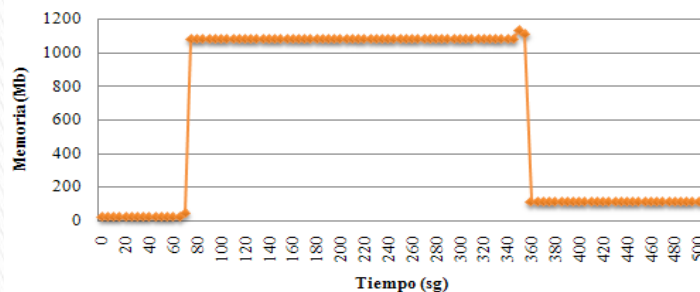
Uso de Memoria (Mb) en nodo07



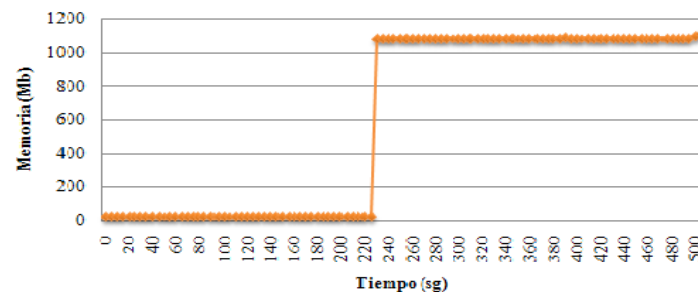
Uso de Memoria (Mb) en nodo03



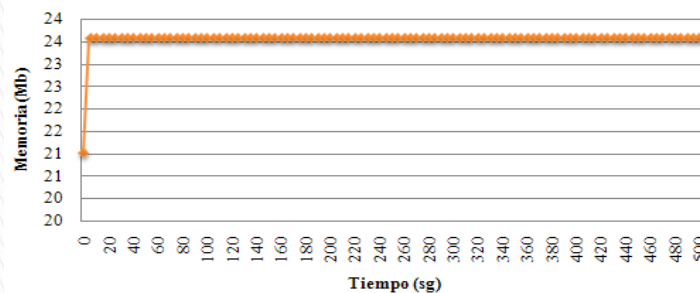
Uso de Memoria (Mb) en nodo05



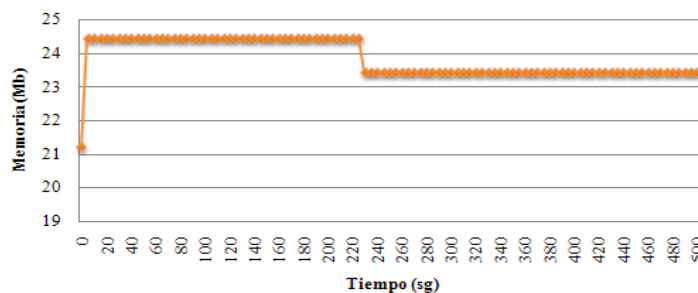
Uso de Memoria (Mb) en nodo01



Uso de Memoria (Mb) Scheduler



Uso de Memoria (Mb) Writer



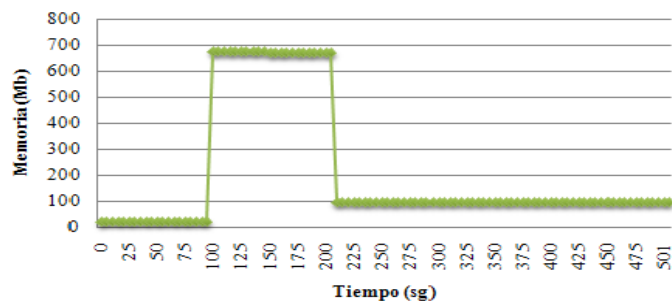
Rendimiento de memoria con mpiBLAST

8 Procesadores

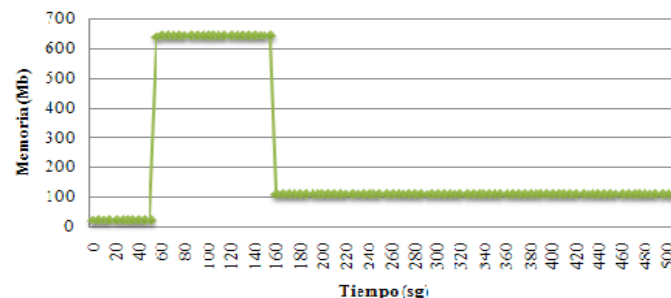
Rendimiento
de Memoria

mpiBLAST

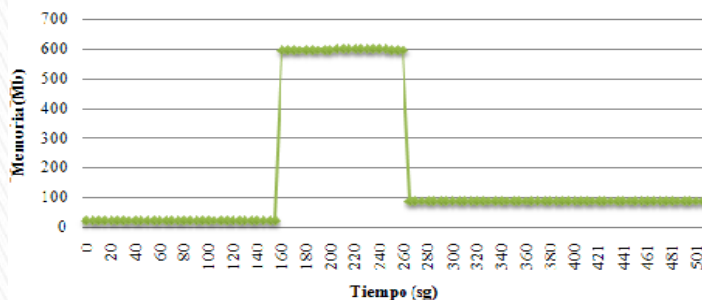
Uso de Memoria (Mb) nodo26



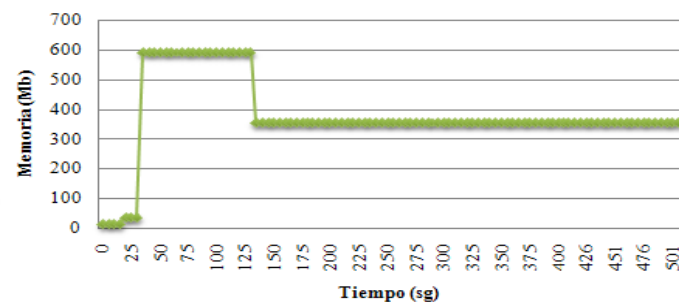
Uso de Memoria (Mb) nodo 30



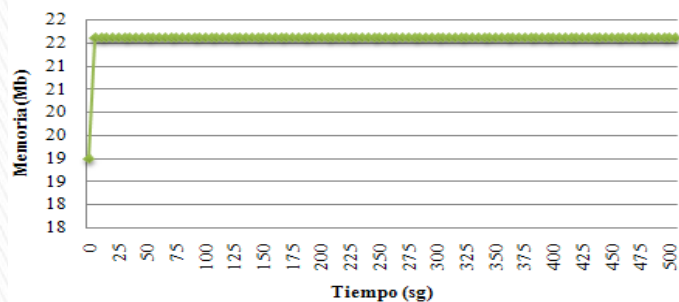
Uso de Memoria (Mb) nodo22



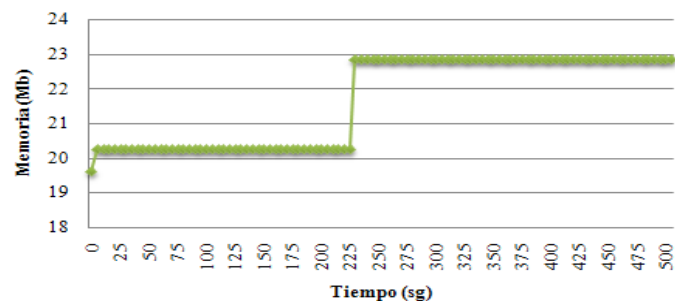
Uso de Memoria (Mb) nodo15



Uso de Memoria (Mb) en Scheduler



Uso de Memoria (Mb) Writer



Rendimiento de memoria con mpiBLAST

32 Procesadores

Granularidad de la carga de trabajo

“El fragmentar la base de datos en un mayor numero de segmentos agiliza la ejecución”.



- Ejecución con 8 y 32 procesadores; con la base de datos:
 - NT 7.130.316,80 KB.
- Formateada en 7,14 y 21 fragmentos para el caso de 8 procesadores.
- Formateada en 31, 62 y 93 fragmentos para el caso de 32 procesadores.

Clúster Desarrollo (8 Procesadores)

Beowulf

- 8 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.

Clúster Producción (32 Procesadores).

Beowulf

- 32 nodos Intel® Pentium® 4 HT
- @3.00GHz
- 1GB DRAM.

Granularidad de la carga de trabajo



Ejecución con 8 nodos de cómputo			
Número de Fragmentos	7	14	21
<i>Tiempo Medio de Distribución por Nodo (sg)</i>	32,89	17,41	10,17
<i>Tiempo Medio de Consulta BLAST por Nodo (sg)</i>	288,39	144,20	122,29
<i>Tiempo Medio de Envío de los Resultados por Nodo(sg)</i>	5,86	3,68	1,92
<i>Tiempo Total de Ejecución (sg)</i>	627,09	626,14	592,92
Ejecución con 32 nodos de cómputo			
Número de Fragmentos	31	62	93
<i>Tiempo Medio de Distribución por Nodo (sg)</i>	5,55	2,79	1,89
<i>Tiempo Medio de Consulta BLAST por Nodo (sg)</i>	113,94	57,77	38,93
<i>Tiempo Medio de Envío de los Resultados por Nodo(sg)</i>	2,02	1,01	0,75
<i>Tiempo Total de Ejecución (sg)</i>	508,13	417,56	434,29

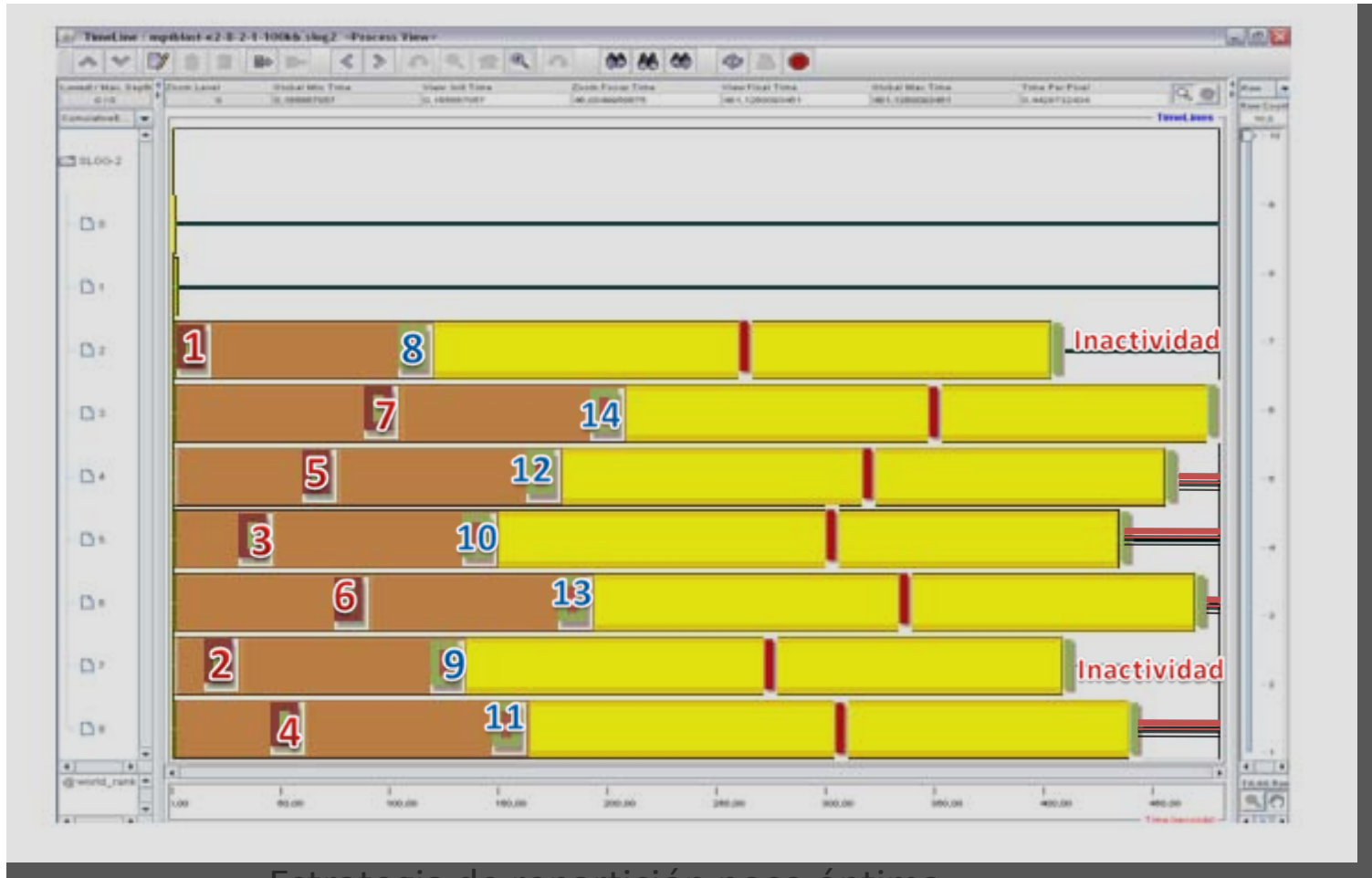
Observándose disminución en los tiempos de ejecución para algunos casos.

Granularidad de la carga de trabajo

Granularidad
del Trabajo



mpiBLAST



Estrategia de repartición poco óptima.

Contenido.

Introducción

- Motivación
- Bioinformática y mpiBLAST
- Ineficiencias en Paralelismo

Análisis de Rendimiento

- Proceso de Análisis de Rendimiento

Experimentos

- Entorno con mpiBLAST
- Resultados

Conclusiones

- Conclusiones Obtenidas
- Líneas Abiertas

Conclusiones Obtenidas.

- ▶ La fase de distribución de fragmentos está serializada.
- ▶ La E/S puede ser estudiada como se ha hecho con los patrones de comunicaciones.
- ▶ La gestión de E/S de los datos está limitando el rendimiento global de la aplicación.
- ▶ Hace falta crear una estrategia que ajuste la granularidad del trabajo.



Líneas Abiertas.

- ▶ Modificar la estrategia de scheduling de fragmentos para que sea realizada dinámicamente.
- ▶ Crear el modelo de rendimiento para mpiBLAST.





¡¡Muchas Gracias por su Atención!!

¿Preguntas ó Sugerencias?