



Proposta para Grupo de Trabalho

GT-mc²: minha *cloud* científica

Antônio Tadeu Azevedo Gomes e Francisco Vilar Brasileiro
18 de agosto de 2011

1. Título

GT-mc²: minha *cloud* científica

2. Coordenador

Coordenador

Antônio Tadeu Azevedo Gomes
Laboratório Nacional de Computação Científica
Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho
25.651-075, Av. Getúlio Vargas, 333, Quitandinha
Petrópolis, RJ
Telefone: (0xx24) 2233 6244
Fax: (0xx24) 2233 6051
E-mail: atagomes@lncc.br
CV Lattes: <http://lattes.cnpq.br/8326803963394077>

Coordenador adjunto

Francisco Vilar Brasileiro
Universidade Federal de Campina Grande
Departamento de Sistemas e Computação
Laboratório de Sistemas Distribuídos
Av. Aprígio Veloso, s/n
58.429-900, Campina Grande, PB
Telefone: (0xx83) 2101 1644
Fax: (0xx83) 3310 1498
E-mail: fubica@dsc.ufcg.edu.br
CV Lattes: <http://lattes.cnpq.br/5957855817378897>

3. Resumo

O objetivo dessa proposta é implantar uma plataforma de computação na nuvem voltada para aplicações científicas, provendo serviços como acesso a grande poder computacional por curtos intervalos de tempo, armazenamento, reprodutibilidade de experimentos e controle de proveniência dos dados, entre outros. A plataforma seguirá um modelo PaaS (*Platform-as-a-Service*), permitindo o fácil desenvolvimento e implantação de serviços personalizados, oferecidos em um modelo SaaS (*Software-as-a-Service*). A pilha de serviços também inclui um *broker* para mediar a alocação de recursos em diferentes tipos de provedores de IaaS (*Infrastructure-as-a-Service*), atendendo requisitos de segurança específicos de cada aplicação e demandas de carga de trabalho típicas de aplicações de e-ciência.

4. Abstract

This proposal aims at deploying a cloud computing service targeted at scientific applications. The platform will provide e-science services such as access to highly

elastic computing, storage, experiment reproducibility, and data provenance control, among other services. The platform will follow the Platform-as-a-Service (PaaS) model, allowing the development and deployment of customized e-science services in a simple way, following a Software-as-a-Service (SaaS) model. The stack of services also includes a broker that is able to mediate the allocation of computing resources in different Infrastructure-as-a-Service (IaaS) providers, catering to specific security requirements of each application, and the typical resource demand of e-science applications.

5. Parcerias

5.1. Instituições Parceiras

Laboratório Nacional de Computação Científica
Coordenação de Ciência da Computação
Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho

Universidade Federal de Campina Grande
Departamento de Sistemas e Computação

Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro
Departamento de Informática

Universidade Federal da Bahia
Departamento de Ciência da Computação

Fundação Oswaldo Cruz
Instituto Oswaldo Cruz

5.2. Realizações e Competências

Todos os membros da equipe têm grande experiência em projetos de pesquisa e desenvolvimento na área de processamento de alto desempenho e alta vazão, além da aplicação desses sistemas para suporte a atividades de e-ciência.

Antônio Tadeu Azevedo Gomes é secretário executivo do SINAPAD (Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho, <http://www.lncc.br/sinapad>), que tem por missão prestar serviços de processamento de alto desempenho (PAD) sob demanda para a comunidade acadêmica e científica nacional, o governo e o setor empresarial, bem como difundir a cultura e os conhecimentos associados a essa tecnologia. Esse consórcio é coordenado pelo LNCC e constituído pelos centros de computação operados pela UFC, UFMG, UFPE, UFRGS, COPPE/UFRJ, Unicamp, INPE e o próprio LNCC. A experiência do LNCC com aplicações de e-ciência e a grande rede de usuários do SINAPAD serão fundamentais para que um grande número de aplicações possam ser portadas para execução no serviço proposto. Antônio Tadeu Gomes também foi coordenador adjunto do GT-VCG nas edições de 2007-2008 (Fase 1) e 2008-2009 (Fase 2) do Programa de Grupos de Trabalho da RNP. Por fim, Antônio Tadeu Gomes atua como coordenador técnico da célula do LNCC no projeto JiT Clouds. Esse projeto, financiado pelo CTIC/RNP, tem por objetivo investigar uma arquitetura alternativa para a construção de provedores de

computação em nuvem, onde os mesmos apenas incorrem em custos de propriedade quando os recursos usados para prover a sua infraestrutura são demandados pelos seus clientes, permitindo uma ampliação de algumas ordens de magnitude no limite que precisa ser imposto aos clientes de tais serviços.

Francisco Vilar Brasileiro é o coordenador geral do projeto JiT Clouds, formado por 15 instituições nacionais e internacionais. Ele também lidera o projeto OurGrid (<http://www.ourgrid.org/>), que vem sendo executado desde 2003, e foi responsável pelo desenvolvimento de tecnologia inovadora em grades computacionais, particularmente para a implantação de grades de livre acesso baseadas na arquitetura entre-pares (*peer-to-peer*). O Laboratório de Sistemas Distribuídos da UFCG, por ele coordenado, estabeleceu recentemente uma parceria com o projeto Ibercivis (<http://www.ibercivis.es/> e <http://www.ibercivis.pt/>). Esse projeto é um dos maiores projetos de computação voluntária da Europa. Atualmente congrega mais de 70.000 computadores domésticos na Espanha e em Portugal, já tendo sido utilizado por mais de 10 aplicações de e-ciência diferentes, gerando vários resultados de pesquisa importantes. Essa parceria culminou com a proposição de um serviço de computação voluntária para o Brasil (“Ciência em sua casa”), que está em fase de implantação, e que opera de forma federada com os recursos do projeto Ibercivis, permitindo a imediata utilização dos recursos dessa infraestrutura por pesquisadores brasileiros.

Renato Cerqueira é coordenador da área de engenharia de sistemas distribuídos do Laboratório Tecgraf da PUC-Rio, que desenvolve projetos de P&D com diversos parceiros industriais e da academia, tais como PETROBRAS, Microsoft Research, Instituto de Pesquisa da Marinha, Globo, CEPEL, IME/USP e LNCC. Esses projetos têm gerado ferramentas de programação distribuída e sistemas de middleware que são usados por grupos de pesquisa e empresas, tanto no Brasil quanto no exterior. Em particular, Renato é o principal arquiteto da plataforma CSBase (<http://jira.tecgraf.puc-rio.br/confluence/display/CSBase/>) para integração de aplicações científicas distribuídas, que vem sendo adotada pelo SINAPAD.

Marcos Ennes Barreto é pesquisador do Laboratório de Sistemas Distribuídos (LaSiD), do Departamento de Ciência da Computação da UFBA, onde atua como coordenador técnico da célula da UFBA no projeto JiT Clouds (financiado pelo CTIC/RNP). Também atua como pesquisador colaborador num projeto de monitoramento e análise de conteúdo ilícito em redes BitTorrent, coordenado pelo professor Luciano Barreto, em parceria com a ONG SaferNet e a Polícia Federal. Possui experiência com sistemas paralelos e distribuídos, adquirida em aproximadamente 15 anos de estudos e pesquisas junto ao Grupo de Processamento Paralelo e Distribuído do Instituto de Informática da UFRGS, no qual desenvolveu sua tese que versou sobre integração de sistemas paralelos heterogêneos. Também atuou como Assistente 1 no GT-UniT (Monitoramento do Universo Torrent), coordenado pelo professor Marinho Barcelos (UFRGS), desenvolvendo atividades de coordenação técnica e administrativa entre os meses de janeiro a maio de 2010.

Alberto Martín Rivera Dávila é pesquisador do Instituto Fiocruz, atuando na área de

bioinformática e com trabalhos de grande relevância nessa área. A FIOCRUZ é parceira do LNCC e da UFCG já há algum tempo e uma das aplicações piloto do serviço proposto será especificada e utilizada pelo grupo de pesquisa liderado por Alberto Dávila.

Artur Ziviani é tecnologista pleno do LNCC, atuando nas áreas de metrologia de redes bem como em análise, modelagem e simulação de redes complexas. Uma das aplicações piloto do serviço proposto será especificada e utilizada pelo grupo de pesquisa coordenado por Artur Ziviani.

6. Duração do projeto

O projeto será desenvolvido em 12 meses.

7. Sumário executivo

7.1. *Background* e Motivação

É reconhecido que muitos dos avanços recentes em pesquisas científicas somente foram possíveis devido à habilidade dos cientistas em usar eficientemente computadores para gerar e processar grandes quantidades de dados. Ao traduzir infraestrutura de Tecnologia da Informação (TI) em serviços elásticos e ilimitados, utilizados sob demanda e pagos de acordo com a quantidade de serviço consumida, o paradigma de computação na nuvem (do inglês *cloud computing*) oferece novas possibilidades para o planejamento de capacidade das instituições que utilizam TI de forma intensiva.

Computação na nuvem é tipicamente oferecida sobre três modelos de serviço distintos, normalmente formando uma pilha de serviços, com cada camada da pilha provendo um nível de abstração diferente.

No nível mais baixo dessa pilha está o que se chama de IaaS (do inglês, *infrastructure-as-a-service*). Nesse nível, recursos de processamento, armazenamento e rede são virtualizados para serem ofertados de forma customizada, atendendo aos requisitos de cada cliente. A virtualização por um lado permite que o cliente possa definir com precisão o ambiente de execução que lhe será ofertado, e por outro, permite que provedores possam multiplexar um mesmo recurso físico entre vários clientes, ao mesmo tempo que garantem o isolamento dos sistemas oferecidos para esses clientes. Podemos entender IaaS como uma evolução do serviço tradicional de hospedagem ou locação de máquinas em centro de dados. A diferença fundamental é que IaaS permite que a alocação de recursos computacionais seja feita de forma simplificada, dinâmica e elástica enquanto que no modelo tradicional de hospedagem e locação o conjunto de recursos alocados é mais estático e as mudanças nos termos de serviço demandam um processo mais demorado.

Os serviços de IaaS podem atender clientes que desejam hospedar suas aplicações em um provedor de computação na nuvem, ou servir de base para a oferta de serviços de mais alto nível como PaaS (do inglês *platform-as-a-service*) e SaaS (do

inglês *software-as-a-service*).

Um provedor de PaaS oferece uma plataforma que permite ao cliente criar e desenvolver aplicações elásticas capazes de atender um grande número de requisições de maneira facilitada e sem ter que se preocupar com os detalhes da plataforma de execução. Um cliente de PaaS tem acesso a um ambiente de desenvolvimento e de gerência de aplicação que permite o desenvolvimento, teste e implantação de aplicações customizadas, oferecidas em um modelo de SaaS, ou seja, através de uma interface Web. As ferramentas de desenvolvimento e as aplicações desenvolvidas são acessadas através de um navegador Web, o que leva a uma necessidade reduzida de instalação de software tanto para o desenvolvedor das aplicações quanto para os usuários dessas aplicações. Essa característica facilita questões de gerência de software e dos dados associados às aplicações.

A comunidade científica não está indiferente a este novo paradigma e várias iniciativas em todo o mundo já investigam a aplicabilidade de ambientes de computação na nuvem para execução de cargas de trabalho científicas (e-ciência) [Fox 2011][Evangelinos 2008][Juve 2009][Keahey 2010][Oliveira 2011][Osterman 2008][Walker 2008][Watson 2011].

Os resultados preliminares indicam que embora sejam ambientes muito flexíveis e simples de se configurar, disponibilizar uma plataforma de computação na nuvem para dar suporte a atividades de e-ciência não é tão automático como desejado, considerando-se as implementações disponíveis. Em particular, a sua efetiva utilização e controle por parte do pesquisador ainda apresenta alguns desafios [Lee 2010]. As principais dificuldades residem principalmente no fato de que as propriedades mais atrativas do paradigma de computação na nuvem para o contexto acadêmico – conveniência e facilidade de uso, ampla elasticidade e níveis adequados de abstração – ainda não são plenamente endereçados pelo estado-da-prática do segmento. Isso ocorre por que os atuais serviços públicos de computação na nuvem foram concebidos tendo em vista o atendimento de requisitos bem específicos como, por exemplo, o suprimento de infraestrutura para pequenas e médias empresas e o suporte computacional para aplicações do estilo Web 2.0, fazendo com que alguns contextos, inclusive o de e-ciência, não sejam ainda apropriadamente atendidos.

Por outro lado, plataformas de suporte a atividades de e-ciência mais tradicionais, como aquelas baseadas em grades computacionais, também têm limitações. Em particular, iniciativas como o GT-VCG da RNP no Brasil e o TeraGrid da NSF nos EUA foram primordialmente orientadas à tecnologia de grades adotada para essas plataformas, o que dificulta a customização dessas plataformas para atender as necessidades específicas de seus usuários. Uma indicação nesse sentido foi o anúncio pela NSF, em julho de 2011, do encerramento do programa TeraGrid e do lançamento de um novo programa chamado XSEDE (EXtreme Science and Engineering Discovery Environment – <http://www.xsede.org>), focado no oferecimento de um ambiente em que cientistas possam usar e compartilhar tanto recursos computacionais quanto aplicações, ferramentas, e serviços.

7.2. O Serviço Proposto

A plataforma mc² é uma PaaS voltada para atender as necessidades da e-ciência. Através dessa plataforma, um desenvolvedor poderá rapidamente customizar ambientes de SaaS para atender necessidades específicas de um usuário ou um grupo de usuários com demandas similares.

O desenvolvimento de aplicações SaaS sobre a plataforma mc² consiste em acessar uma interface Web de fácil utilização e configurar os elementos necessários para dar suporte aos requisitos específicos de uma aplicação particular. Esses elementos são implementados pela plataforma de PaaS e apenas customizados pelos usuários dessa plataforma – os desenvolvedores de aplicações de e-ciência. Após a criação da aplicação de e-ciência, seguindo o modelo SaaS, a mesma estará disponível para ser acessada através de sua interface particular, bastando que o(s) usuário(s) da aplicação SaaS – o(s) cientista(s) – aponte seu navegador para a URL associada à mesma. Dessa forma, cada usuário de aplicação de e-ciência terá uma visão única do serviço de computação na nuvem que dá suporte a sua aplicação, dando-lhe a impressão de que ele opera sobre a sua própria nuvem particular (“a minha *cloud* científica!”).

Esses ambientes de SaaS funcionam de maneira similar a portais Web, também chamados de *science gateways* no contexto de aplicações de e-ciência, permitindo uma fácil interação do cientista com a infraestrutura de TI. Ao diminuir sensivelmente a curva de aprendizado para que o usuário comece a realizar trabalho útil com a ferramenta, o ambiente de SaaS aumenta substancialmente a produtividade do cientista, que pode se concentrar majoritariamente no objeto de sua investigação, e não com os detalhes do ferramental tecnológico que lhe é disponibilizado.

Um diferencial da plataforma mc² com relação aos *science gateways* tradicionais é o oferecimento de suporte para a fácil adaptação a cenários específicos de serviços comuns às aplicações de e-ciência, como por exemplo a submissão de execuções em infraestruturas de processamento de alto desempenho (HPC, do inglês *high-performance computing*) e de alta vazão (HTC, do inglês *high-throughput computing*); o armazenamento confiável e seguro de grandes massas de dados; o registro de meta-informação associada a experimentos, permitindo a reprodutibilidade dos mesmos; o registro de meta-informação associada aos dados de entrada e saída para controle da proveniência dos mesmos, entre outros.

Boa parte das aplicações de e-ciência são grandes consumidoras de recursos computacionais, seja processamento, armazenamento ou rede. O serviço proposto irá se apoiar no serviço de IaaS provido por outros parceiros, inclusive pela própria RNP. Para tal, a plataforma mc² se apóia sobre uma camada que realiza o *brokering* de serviços de IaaS. A Figura 1 ilustra a arquitetura da plataforma mc².

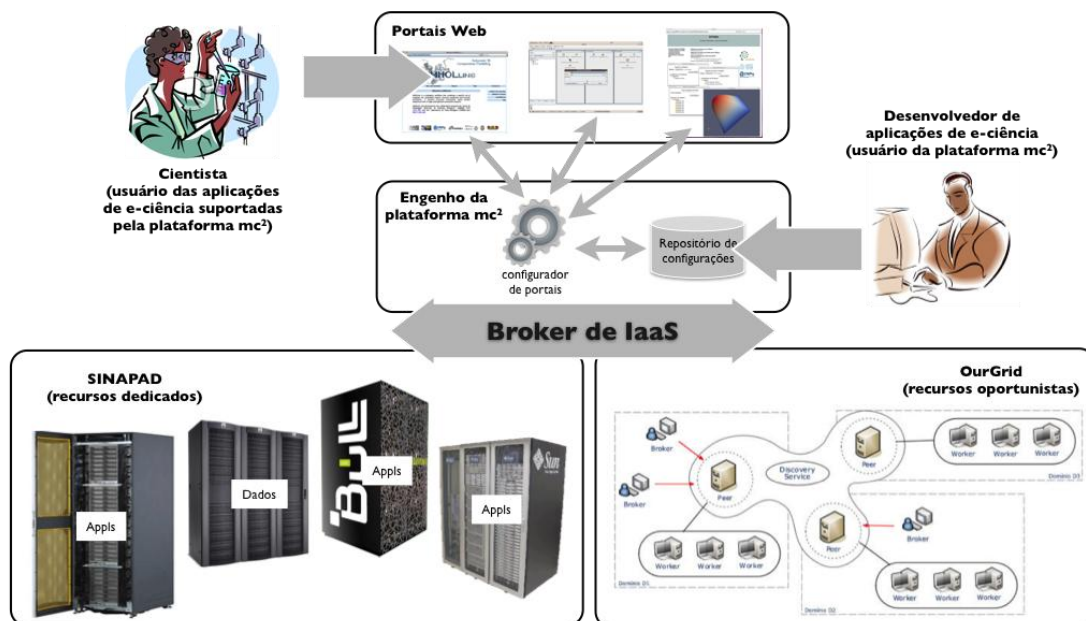


Figura 1: Arquitetura da plataforma mc²

A camada de *brokering* permite que qualquer provedor de IaaS possa ser usado pelas aplicações oferecidas no modelo SaaS desenvolvidas sobre a plataforma mc², bastando para isso que sejam desenvolvidos adaptadores apropriados que implementem a interface entre a plataforma mc² e o provedor de IaaS específico.

7.3. Escopo e Viabilidade Técnica do Protótipo

O protótipo da plataforma mc² que será desenvolvido durante a execução do projeto irá implementar os seguintes serviços: i) suporte à execução de aplicações de HPC e HTC; ii) armazenamento de dados; iii) suporte a reprodutibilidade de experimentos; e iv) anotação de dados de entrada e saída para dar suporte a atividades relacionadas com o controle de proveniência dos dados.

A implementação da plataforma de PaaS se apoiará fortemente na integração de ferramentas maduras e já testadas, como por exemplo a plataforma CSBase (<http://jira.tecgraf.puc-rio.br/confluence/display/CSBase/>) desenvolvida pela PUC-Rio e utilizada pelo LNCC e pela UFCG para a criação de *science gateways* e para integração de *backends* de execução.

Nesse primeiro protótipo iremos desenvolver suporte para três plataformas de execução distintas, adaptadas para a operação em um modelo IaaS: grades computacionais *peer-to-peer* baseadas no middleware OurGrid (<http://www.ourgrid.org/>); ii) serviços de computação voluntária baseados no middleware BOINC (<http://boinc.berkeley.edu/>); e iii) sistemas computacionais de alto desempenho do SINAPAD integrados pelo middleware CSBase.

Serão desenvolvidas pelo menos três aplicações sobre a plataforma mc², que servirão como prova de conceito da plataforma. Essas aplicações serão definidas pela FIOCRUZ e pelo LNCC.

A experiência com as aplicações definidas por esses dois parceiros identificará limitações e novas necessidades para a plataforma mc² que poderão ser atendidas

em uma segunda etapa, buscando-se ampliar a usabilidade da plataforma de tal forma a poder atender a todas as instituições usuárias da RNP com demandas de e-ciência. Da mesma forma, outros provedores de IaaS deverão receber suporte em uma segunda etapa do projeto, à medida que novas necessidades surgirem por parte das aplicações e dos usuários do serviço.

Em relação à viabilidade técnica do projeto, ressaltamos a experiência dos parceiros com projetos de desenvolvimento de software distribuído, com portais Web para aplicações científicas, com plataformas de HPC e HTC, e com a utilização desses sistemas para dar suporte a atividades de e-ciência. Essa experiência reduz os riscos associados a dificuldades técnicas e gerenciais durante o desenvolvimento do protótipo. Da mesma forma, tanto o LNCC como a UFCG dispõem de infraestrutura tanto de software como de hardware para operação do protótipo proposto. Além disso, tanto o LNCC como a UFCG têm experiência com a operação de serviços com a qualidade requerida por usuários externos.

7.4. Resultados Esperados

Os resultados esperados com a execução deste projeto são os seguintes:

- plataforma para desenvolvimento de aplicações científicas customizadas usando o modelo de PaaS;
- pelo menos três implementações de adaptadores da plataforma no nível de IaaS para infraestruturas de processamento e armazenamento com características distintas (grades P2P, serviços de computação voluntária e sistemas computacionais de alto desempenho);
- implementação de pelo menos três aplicações no modelo SaaS usando a plataforma de PaaS desenvolvida, que servirão de prova de conceito.

8. Ambiente para testes do protótipo

O serviço de PaaS irá executar em servidores do LNCC e da UFCG. O serviço de armazenamento associado à plataforma PaaS utilizará recursos do LNCC, podendo ser ampliado com outros serviços de armazenamento providos pelos parceiros. Recursos provenientes da RNP, tais como os disponíveis nos PoPs, poderão ser igualmente considerados, desde que possam ser ajustados para as diferentes plataformas de IaaS consideradas. Em particular, será considerada a integração com o protótipo de serviço desenvolvido como parte do GT-Digital Preservation da RNP.

Os testes do protótipo serão executados considerando-se os três diferentes ambientes adotados no nível de IaaS: uma grade P2P (a Comunidade OurGrid – <http://status.ourgrid.org/>), um serviço de computação voluntária (o Serviço “Ciência em sua casa”, em implantação pela UFCG e baseado no middleware BOINC) e recursos de alto desempenho providos pelo SINAPAD. Para as demonstrações durante o Workshop da RNP em maio de 2012, prevê-se que pelo menos a Comunidade OurGrid e o SINAPAD estejam integrados por meio da camada de *brokering* desenvolvida neste projeto.

As aplicações-piloto de e-ciência serão escolhidas de forma a poder testar os três ambientes de execução, considerando a adequação da aplicação para execução em cada plataforma. Aplicações já em execução na Comunidade OurGrid, no SINAPAD e no Serviço “Ciência em sua casa” serão escolhidas para compor o portfólio de aplicações a serem testadas. Para as demonstrações durante o Workshop da RNP em maio de 2012, prevê-se que pelo menos uma aplicação de *docking* de proteínas da FIOCRUZ e uma aplicação de análise e simulação de redes de complexas do LNCC sejam apresentadas executando na plataforma.

9. Referências

Cirne, W., Paranhos, D., Costa, L., Santos-Neto, E., Brasileiro F. et al. (2003) *Running Bag-of-Tasks Applications on Computational Grids: The MyGrid Approach*, Proc. of the ICCP'2003 – Int. Conference on Parallel Processing.

Costa, R., Brasileiro, F., Lemos, G., and Mariz, D. (2009) *OddCI: on-demand distributed computing infrastructure*. In Proceedings of the 2nd Workshop on Many-Task Computing on Grids and Supercomputers (Portland, EUA). ACM MTAGS '09.

Costa, R., Brasileiro, F., Lemos, G. and Mariz, D. (2010) *Just in Time Clouds: Enabling Highly-Elastic Public Clouds over Low Scale Amortized Resources*. Technical Report. Disponível em <http://www.lsd.ufcg.edu.br>.

Costa, R., Brasileiro, F., Lemos, G., Mariz, D. (2011) *Sobre a Amplitude da Elasticidade dos Provedores Atuais de Computação na Nuvem*. Anais do SBRC 2011.

Evangelinos, C., and Hill, C. (2008) *Cloud Computing for parallel Scientific HPC Applications: Feasibility of running Climate Models on Amazon's EC2*.

Fox, A. (2011) *Cloud Computing—What's in It for Me as a Scientist?*. In Science Vol. 331 no. 6016, pp. 406-407.

Juve, G. et. al. (2009) *Scientific Workflow Applications on Amazon EC2*. In 5th IEEE International Conference on e-Science.

Keahey, K. (2010) *Another Barrier Goes Down*, <http://scienceclouds.org/blog/>

Lee, C. A. (2010) *A Perspective on Scientific Cloud Computing*. In Proc. of the 19th ACM International Symposium on High Performance Distributed Computing. p. 451-459.

Lu, W., Jackson, J., Ekanayake, J., Barga, R.S., Araujo, N. (2010) *Performing Large Science Experiments on Azure: Pitfalls and Solutions*. In Proc. of the CloudCom 2010. pp. 209-217.

Oliveira, D., Baião, F. and Mattoso, M. (2011) *Migração de Experimentos Científicos para a Nuvem*. SBC Horizontes, abril 2011.

Ostermann, S., Iosup, A., Yigitbasi, N. et al. (2008) *An Early Performance Analysis of Cloud Computing Services for Scientific Computing*. pp. 1-24.

Walker, E. (2008) *Benchmarking Amazon EC2 for high-performance scientific*

computing. *Login*, vol. 33 no. 5, Usenix.

Watson, P., Hiden, H., Woodman, S. (2010) e-Science Central for CARMEN: Science as a Service. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, vol. 22, no. 17, pp. 2369-2380, Elsevier.