



UNIVERSIDAD DE LAS AMÉRICAS - PUEBLA

E-GROV: EXPLOTACIÓN DE MEGA BASES DE DATOS ASTRONÓMICAS EN GRID

REPORTE TÉCNICO

DR. JOSÉ LUIS ZECHINELLI MARTINI (COORDINADOR)

GRUPO ADMINISTRACIÓN DE DATOS Y DE CONOCIMIENTO
CENTIA



DESCRIPCIÓN SINTÉTICA DEL PROYECTO

El proyecto e-GrOV (12 meses) aporta soluciones para la construcción de ambientes de análisis científico que hacen intervenir grandes volúmenes de datos y que pretenden utilizar al máximo capacidades de cómputo distribuida alrededor de una Grid. El objetivo es construir una mini-grid que:

- organice, administre, dé acceso y difunda mega muestras de datos astronómicos,
- permita ejecutar procesos científicos usando herramientas y conocimiento para apoyar el análisis masivo de datos astronómicos.

El proyecto e-GrOV se apoya en un equipo multidisciplinario en áreas de la computación conectará tres sitios a través de Internet2 y ofrecerá una plataforma para efectuar experimentos científicos que hagan intervenir grandes masas de datos y procesos de cómputo masivo necesarios para apoyar el trabajo de investigación en astrofísica. Los resultados clave de e-GrOV son:

- Mini-Grid para la explotación masiva de mega-bases de datos astronómicos y servicios para la ejecución de e-experimentos científicos.
- Biblioteca virtual de conocimiento técnico para el uso de los datos y servicios (programas y bibliotecas de software) de la mini-Grid.

La experiencia en el montaje de una Grid gracias a Internet2 y de su uso para hacer ciencia contribuye a la formación de estudiantes en las instituciones participantes y permite formar colaboraciones sólidas para explotar ampliamente recursos de cómputo y de almacenamiento. Gracias a Internet2, e-GrOV permitirá dar un paso más hacia la construcción de un Observatorio Virtual Mexicano.

Proponemos desarrollar el proyecto e-GrOV en 12 meses a lo largo de los cuales se capitalizarán y federarán los sistemas y recursos que cada institución ha venido desarrollando localmente. Se organizarán seminarios técnicos y reuniones de trabajo. Se harán demostraciones en foros nacionales e internacionales así como algunos expertos en bases de datos y en astrofísica viajarán a los laboratorios participantes para contribuir en las actividades del proyecto. Las siguientes secciones describen los lotes de trabajo y las tareas que definen la metodología que adoptaremos para realizar el proyecto.

1. ACTIVIDADES Y RESULTADOS

De acuerdo al calendario de actividades propuesto (cf. Figura 1), los primeros seis meses del proyecto fueron dedicados a la configuración de una mini-grid para la creación de mega bases de datos.

1.1. CREACIÓN DE MEGA-BASES DE DATOS (LOTE 1)

Participantes:

Dr. José Luis Zechinelli Martini

Dra. Genoveva Vargas Solar

Alberto Portilla Flores (estudiante de doctorado)

Javier Alfonso Espinosa Oviedo (estudiante de maestría)

Gabriela Montiel Moreno (estudiante de maestría)

Lourdes Angélica Martínez Medina (estudiante de maestría)

Víctor Hernández Baruch (estudiante de licenciatura)

- Configuración del servidor e-GrOV e implementación de la conexión con la base de datos del INAOE a través de una aplicación Java.
- Se instaló el sistema de mediación de datos ANDROMEDA sobre el servidor e-GrOV que permite integrar datos astronómicos de diferentes bases de datos.
- Se preparo la primera versión de la documentación sobre las instalaciones y configuraciones de los SGBDs de Postgres y MySQL sobre el servidor de e-GrOV que formarán parte de la biblioteca virtual de conocimiento.
- Se copió información localizada en el INAOE usando ANDROMEDA, sobre el servidor e-GrOV para empezar a llevar a cabo los experimentos.
- ENTREGABLE 0: Se activó un sitio de trabajo para el proyecto e-GrOV <http://groups.google.com/group/e-grov>.
- ENTREGABLE 1: Se activó la conexión a IPV6 en la UDLA y se asignó 1 servidor y 300 Gigabytes de almacenamiento en disco. Este espacio se agrega al terabyte de disco del INAOE. Se trabajó en la configuración de la plataforma y en los accesos a los servidores intra e inter institucionales. Actualmente es posible comunicar las bases de datos entre la UDLA y el INAOE y se está procediendo a instalar el proceso de llenado y administración automática.
- ENTREGABLE 2: Se activó la conexión alta velocidad entre el INAOE y la UDLA. La UATx trabajó igualmente en la configuración de su acceso a Internet 2.
- ENTREGABLE 3: Se escribió una primera versión del manual técnico de los sitios de la Gris UDLA, INAOE, UATx. Sin embargo, debido a cambios en las políticas de gestión de servidores en la UDLAP, la versión final del manual está en curso. **El grupo UDLA acaba de obtener los derechos de uno de sus servidores la semana del 7 de julio, el segundo servidor será disponible a partir de la semana del 21 de julio. La mini-Grid deberá ser modificada en consecuencia.**
- ENTREGABLE 4: Construimos una primera mega-bases de datos y activamos el acceso INAOE-UDLA. La conexión no pudo hacerse con la UATx a causa del cambio de políticas en la UDLA. **Como indicamos antes, estamos haciendo las negociaciones necesarias**

para reactivarlo y generar un sistema de acceso para la mini-Grid tal y como se previó en la definición inicial del proyecto.

1.2. **WORKFLOW CIENTÍFICO (LOTE 2)**

Participantes:

Dr. Luciano García Bañuelos
Dr. José Federico Ramírez Cruz
Abel Armas Cervantes
Juan Manuel Ramírez Arrijoja
Miguel Ángel Márquez Rosas

Un aspecto primordial en el desarrollo de experimentos científicos en la Grid es la coordinación de las varias fases del procesamiento de grandes masas de información. En este respecto, el equipo de la Universidad Autónoma de Tlaxcala se enfoca de manera particular en la coordinación y en el uso de algoritmos inteligentes avanzados para el procesamiento de datos. Debido a que la experiencia previa del equipo en el área de coordinación de tareas o *Workflow* es básicamente en sus aplicaciones sobre automatización de procesos de negocios, nos hemos dado a la tarea de analizar las particularidades de trabajos existentes en *Workflow* Científico.

De entre los trabajos representativos en *Workflow* Científico, se analizaron las propuestas de Kepler [4], Pegasus [2], ASKALON [3] y JOpera [5], entre otros. Un aspecto a destacar es que el *Workflow* Científico tiene un especial énfasis en la manipulación de grandes colecciones de datos, hecho que es poco usual para *Workflow* orientado a negocios. Por esta razón, un gran número de lenguajes de *Workflow* Científico están orientados al flujo de datos en contraste con el convencional paradigma orientado al flujo de control usado en *Workflow* orientado a negocios. Se debe mencionar que los lenguajes orientados al flujo de datos pueden resultar en especificaciones de difícil comprensión. Esto ha motivado esfuerzos para integrar ambos paradigmas [1,5,6]. En esta misma línea el equipo ha iniciado un trabajo, reflejado en el proyecto de Tesis de Maestría de Miguel Ángel Márquez.

Cabe mencionar que el análisis de prototipos de *Workflow* científico incluye la prueba del software subyacente, si está disponible. Este análisis que continúa. Como un proceso exploratorio, se ha experimentado con el uso de algunos motores de ejecución de *Workflow* libre (p.e. Apache Ode) y de editores de *workflows* (p.e. Eclipse STP BPMN Modeler) y evaluando su utilidad en el área.

Como parte del proceso de reflexión, se han abordado varios problemas subyacentes. De entre estos, las problemáticas de traducir notaciones gráficas usadas por los lenguajes de *Workflow* en el código de ejecución correspondiente y las de integrar a ese proceso de traducción la asignación de recursos y planificación de tareas.

- **ENTREGABLE 8:** Se implementó una plataforma de ejecución de experimentos basada en la ejecución de *Workflow* científicos. La plataforma se ha validado dentro de la UATx por falta de conexión a la mini-Grid. La evaluación se hará sobre la mega-base de datos a través del nodo UDLAP una vez abierto.
- **ENTREGABLE 9:** El manual técnico de la plataforma de ejecución de experimentos está en curso y no se podrá completar hasta hacer la conexión con el nodo UDLAP.

1.3. **BASE DE DATOS ASTRONÓMICA Y BIBLIOTECA DE CONOCIMIENTO (LOTE 3)**

Participantes:

Dr. Aurelio López López
Dr. Roberto Terlevich
Dra. Elena Terlevich

Dr. Juan Pablo Papaqui

El trabajo de los primeros seis meses se plantea como el inicio para la automatización de la población de la base de datos. Trabajamos en la descompresión de archivos propietarios de tipo FITS en formato ASCII y logramos implementar un proceso de semi-automático. Se construyó una mega base de datos relacional y se escribieron programas para automatizar la población de la base (1 terabyte). Se estableció conexión con los sistemas de la UDLA como se describió en la sección 2.2.

Los datos se obtienen del DR3 de la dirección http://das.sdss.org/DR3/data/spectro/1d_23. Los archivos comprimidos se guardaron en la computadora llamada cluster, en el directorio: /home4/DR3 y contiene todas las placas. El tamaño total del directorio es de 66 GigaBytes.

Para el DR4 se obtienen los datos de: http://das.sdss.org/DR4/data/spectro/ss_tar_23. Los archivos comprimidos se están guardando en la computadora llamada cluster en el directorio /home4/DR4 y se espera que use un espacio de 87 Gigabytes. El anexo II muestra la organización de la mega-base de datos construida.

Se ha trabajado en la constitución de la biblioteca virtual de conocimiento a través del sistema Pegos3. Estamos trabajando en la construcción de un motor de búsqueda y un administrador de conocimiento para permitir la administración del conocimiento asociado a la construcción y uso del Observatorio Virtual.

- **ENTREGABLE 5:** Se construyó la colección inicial de una biblioteca digital de documentos para el observatorio virtual y las herramientas asociadas. La colección está disponible a través del sistema Pegos3 y a través de la wiki del proyecto e-GrOV. **Una vez más la conexión entre los nodos, una vez resueltas las políticas de seguridad institucionales permitirá el acceso a esta colección.**
- **ENTREGABLES 6 Y 7:** Motor de búsqueda y clasificación de documentos y manual técnico de la biblioteca digital están en curso y se terminarán una vez resueltos los problemas técnicos de acceso.

1.4. PUBLICACIONES

- [1] Cardaci, M. V.; Hägele, G. F.; Díaz, A. I.; Terlevich, E.; Terlevich, R.; Castellanos, M., (2007), "Spectroscopy of Circumnuclear Star Forming Regions in Early Type Spirals", in From Stars to Galaxies: Building the Pieces to Build Up the Universe. ASP Conference Series, Vol. 374, p.137 proceedings of the conference held 16-20 October 2006 at Istituto Veneto di Scienze, Lettere ed Arti, Venice, Italy. Edited by Antonella Vallenari, Rosaria Tantalò, Laura Portinari, and Alessia Moretti.
- [2] Daniel Rosa—González, Denis Burgarella, Kirpal Nandra, Daniel Kunth, Elena Terlevich, Roberto Terlevich, 2007, "Multiwavelength Study of X-ray Selected Star Forming Galaxies within the Chandra Deep Field South"; 379, 357-369.
- [3] Díaz, Ángeles I., Terlevich, Elena, Castellanos, Marcelo, Hägele, Guillermo F. 2007 "The metal abundance of circumnuclear star-forming regions in early-type spirals. Spectrophotometric observations"; 382; 251-269.
- [4] Díaz, Ángeles I.; Hägele, Guillermo F.; Terlevich, Elena; Terlevich, Roberto (2008), arXiv:0801.3078, "Properties of the ionized gas of circumnuclear star-forming regions in early type spirals" in Young massive star clusters - Initial conditions and environments, Granada, Spain, 2007, 7 pages.
- [5] Díaz, Ángeles I.; Terlevich, Elena; Hägele, Guillermo F.; Castellanos, Marcelo (2008), arXiv:0801.3075; 4 pages Proceeding of the meeting "Pathways Through an Eclectic Universe", Tenerife, 2007.
- [6] Gero Decker, Remco Dijkman, Marlon Dumas, and Luciano García-Bañuelos. A Tool for Transforming BPMN to YAWL. Proceedings of the BPM 2008 Conference, Milan, Italy, September 2008.
- [7] Hägele, G. F.; Pérez-Montero, E.; Díaz, A. I.; Terlevich, E.; Terlevich, R. 2007 "Effects of the Temperature Structure on the Derivation of Abundances in HII Galaxies" in From Stars to Galaxies: Building the Pieces to Build Up the Universe. ASP Conference Series, Vol. 374, p.143 proceedings of the conference held 16-20 October 2006 at Istituto Veneto di Scienze, Lettere ed Arti, Venice, Italy. Edited by Antonella Vallenari, Rosaria Tantalò, Laura Portinari, and Alessia Moretti.

- [8] Hägele, Guillermo F., Díaz, Ángeles I., Terlevich, Elena, Terlevich, Roberto, Pérez-Montero, Enrique, Cardaci, Mónica V. (2008) "Precision abundance analysis of bright HII galaxies"; *Monthly Notices Royal astronomical Society*, 383; 209-229.
- [9] Hägele, Guillermo F.; Díaz, Ángeles I.; Cardaci, Monica V.; Terlevich, Elena; Terlevich, Roberto (2008) arXiv:0801.3081 "Kinematics of gas and stars in circumnuclear star-forming regions of early type spirals", in *Young massive star clusters - Initial conditions and environments*, Granada, Spain, 2007; 4 pages.
- [10] M. Cerviño, E. Terlevich, R. Terlevich, C. Rodrigo-Blanco, V. Luridiana, A. López and E. Solano (2007). Synthesis models in the VO framework. *Proceedings of the International Astronomical Union*, 2, pp 171-172 doi:10.1017/S1743921307007739, CUP.
- [11] Montiel Moreno G., Zechinelli-Martini J.L., Vargas-Solar G., SISELS: semantic integration system for exploiting biological resources, In *Proceedings of the 4th Workshop on Clinical and Medical Computing*, in conjunction with ENC, September, 2007.
- [12] Montiel Moreno G., Zechinelli-Martini J.L., Vargas-Solar G., SISELS: semantic integration system for exploiting biological resources, In *Proceedings of the 4th Workshop on Clinical and Medical Computing*, in conjunction with ENC, IEEE, 2008.
- [13] Montiel Moreno G., Zechinelli-Martini J.L., Vargas-Solar G., SISELS: a mediation system for giving access to scientific resources, In *Special Issue in Neural Networks and Associative Memories*.
- [14] *Research in Computing Science*, 2008 (to appear).
- [15] Portilla A., Collet Ch., Vargas-Solar G., Zechinelli-Martini J.L., García-Bañuelos L., Contract based behavior model for services coordination, *Lecture Notes in Business Information Processing*, Springer Verlag, 2008.
- [16] Portilla Alberto, Vargas-Solar Genoveva, Collet Christine, Zechinelli-Martini José-Luis, García-Bañuelos Luciano, Hernández-Baruch Víctor, ROSE: A transactional services coordination engine, *Demonstration In Proceedings of 23èmes Recontres sur les Bases de Données Avancées BDA07*, Marseille-France, October, 2007.
- [17] Schoenell, W.; Cervino, M.; Cid Fernandes, R.; Mateus, A.; Terlevich, E.; Terlevich, R.; de los Santos, F.; Torres-Papaqui, J. P.; Luridiana, V. (2007) "Results of an analysis of SDSS galaxies in the VO", Poster contribution to "Workshop on Astronomical Spectroscopy and the Virtual Observatory" ESA pub in press. 2 pages.
- [18] Vargas-Solar Genoveva, Zechinelli-Martini José-Luis, Cuevas-Vicenttin Victor, The e-GrOV data Grid: a step towards the Mexican Virtual Observatory, *Special Issue on Data Management in Grid and P2P Systems*, *International Journal of Computer Systems Science and Engineering*, 2008.
- [19] Portilla Alberto, Hanh Tan, Espinosa-Oviedo Javier-Alfonso, Building reliable mobile services based applications, *In Proceedings of the 1st workshop DS2ME*, In conjunction with ICDE, IEEE, March, 2008.

2. CONCLUSIONES

Nos parece importante señalar que los avances del proyecto se respetaron en los primeros 7 meses con respecto al calendario y los entregables previstos. Sin embargo, los cambios en las políticas de acceso a los recursos y de uso de los servidores en la UDLAP retrasaron los avances de los 5 últimos meses. Debido a ello retrasamos también la compra de los servidores y disco previstos en la UDLAP.

Las becas otorgadas para el proyecto han sido designadas en el INAOE a un postdoctorado experto en la construcción de mega-bases de datos. En el caso de la UAT, Abel Armas Cervantes y Juan Manuel Ramírez Arriola son becarios desde septiembre medio tiempo cada uno. Ambos son estudiantes de licenciatura en Ingeniería en Computación de la Universidad Autónoma de Tlaxcala.

En la UDLA hemos esperado a consolidar la infraestructura de conexión para designar becas a tres participantes del proyecto, Javier Alfonso Espinosa Oviedo (6 meses), Gabriela Montiel Moreno (4 meses) y Lourdes Angélica Martínez Medina (2 meses) estudiantes de maestría en Ciencias de la Computación de la UDLA. Los estudiantes debían haberse comenzado a beneficiarse de la beca e-GrOV a partir de enero de 2008. Sin embargo, decidimos postergar el trabajo dado que no había manera de tener acceso los servidores para trabajar en conexiones e integración de la Mini-Grid. **Solicitamos una prórroga para el uso de los recursos dado que a partir de mediados de julio los servidores y conexión en la UDLAP están de nuevo a disposición para el proyecto.**

En cuanto a las perspectivas. La Dra. Vargas Solar viajó a Francia (15 de octubre al 15 de diciembre) para trabajar en la implementación de mecanismos de gestión de grandes bases de datos en cooperación con el Laboratorio de Informática de Grenoble. El objetivo fue negociar acceso a la Grid 5000 en Francia y buscar trabajar con el Instituto de Grid del Centro Nacional de la Investigación Científica de ese país que se inauguró este mes.

REFERENCIAS

- [1] S. Bowers, B. Ludaescher, A. H.H. Ngu, T. Critchlow. Enabling Scientific Workflow Reuse through Structured Composition of Dataflow and Control-Flow, In *IEEE Workshop on Workflow and Data Flow for Scientific Applications (SciFlow)*, 2006.
- [2] E. Deelman, G. Singh, M.H. Su, J. Blythe, Y. Gil, C. Kesselman, G. Mehta, K. Vahi, G.B. Berriman, J. Good, A. Laity, J.C. Jacob, D.S. Katz. *Pegasus: a Framework for Mapping Complex Scientific Workflows onto Distributed Systems*. *Scientific Programming Journal*, 13(3), pp 219–237, 2005.
- [3] T. Fahringer, J. Qin, S. Hainzer. Specification of Grid Workflow Applications with AGWL: An Abstract Grid Workflow Language. In *Proceedings of IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid 2005 (CCGrid 2005)*, Cardiff, UK, May 9–12, 2005.
- [4] B. Ludscher, I. Altintas, C. Berkley, D. Higgins, E. Jaeger-Frank, M. Jones, E. Lee, J. Tao, Y. Zhao. *Scientific Workflow Management and the Kepler System*, *Concurrency and Computation: Practice & Experience*, 18(10), pp. 1039–1065, 2006.
- [5] C. Pautasso, G. Alonso, Parallel Computing Patterns for Grid Workflows, In *Proceedings of the HPDC2006 workshop on Workflows in support for large-scale Science (WORKS06)*, 2006.
- [6] J. Qin, T. Fahringer. Advanced Data Flow Support for Scientific Grid Workflow Applications. In *Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (Supercomputing 2007, SC|07)*, IEEE Computer Society, 2007.

ANEXO I: RECAPITULATIVO DE LOTES DE ACTIVIDADES

A continuación presentamos un recapitulativo de los lotes de actividades previstos en el proyecto. Tal y como le propusimos, durante los primeros seis meses nos concentramos en las actividades de los lotes 1 y 3 para preparar las actividades del lote 2. La sección 2 describirá los logros obtenidos.

2.1. LOTE 1: MINI-GRID Y MEGA BASES DE DATOS

COORDINADOR DEL LOTE: UDLAP

El objetivo de este lote es construir una Mini-Grid que ofrezca una plataforma de datos, documentos, aplicaciones y librerías, y servicios de cómputo.

- Conexión de los tres sitios UDLAP, INAOE y UATx a través de Internet2 con IPV6 para generar la plataforma mini-Grid de datos. (T1.1)
- Instalación de nodos ANDROMEDA en los nodos de los sitios de la mini-Grid. (T1.2)
- Creación de mega bases de datos (muestras de datos de aprox. 1000 Gigabytes) a través de la ejecución de consultas distribuidas ejecutadas por ANDROMEDA. (T1.3)
- Almacenamiento de muestras en la mini-Grid bajo una organización basada en índices multi-dimensionales distribuidos. (T1.4)

El ancho de banda de Internet2 será crucial para transferir cantidades importantes de datos (Gigabytes) para construir las mega-bases de datos y para ejecutar consultas distribuidas.

2.2. LOTE 2: AMBIENTE DE ANÁLISIS DE DATOS: WORKFLOWS CIENTÍFICOS

COORDINADOR DEL LOTE: UATX

El objetivo de este lote es crear un ambiente de composición de experimentos (definición y ejecución) tomando en cuenta:

- Instalación de servicios en la mini-Grid. Los servicios incluirán mecanismos de construcción de muestras, herramientas de análisis y de visualización. (T2.1)
- Definición de *workflows* científicos para implementar un experimento descrito por la colección de datos de interés; la secuencia de algoritmos (análisis y visualización) que quiere aplicar; la parte de la colección y de los resultados parciales que van a participar para cada algoritmo y que serán registrados. (T2.2)
- Ejecución de *workflows* científicos sobre los sitios de la mini-Grid considerando los costos de ejecución dado el volumen de datos y el costo de cálculo de los algoritmos de análisis. (T2.3)
- Generación y almacenamiento de bitácoras de experimentos que permitan reproducirlos varias veces en las mismas condiciones. (T3.3)

2.3. LOTE 3: BIBLIOTECA VIRTUAL DE CONOCIMIENTO

COORDINADOR DEL LOTE: INAOE

El objetivo es construir una biblioteca virtual de documentos que describan los recursos que ofrecerá la mini-Grid, manuales de uso, ejemplos y experiencias de uso y comentarios sobre la realización de experimentos. El proyecto parte de una iniciativa del INAOE que ya ha clasificado y puesto a disposición documentos a través del sistema Pegos3.

- Generación de una biblioteca de documentos en cada sitio UDLA, INAOE, UATx que haga la descripción técnica del sitio y de los servicios que ofrece. (T3.1)
- Conexión de bases de documentos. (T3.2)
- Construcción de una herramienta de búsqueda de documentos que facilite el uso de la biblioteca. (T3.3)

ANEXO II: LISTA DE ENTREGABLES Y CALENDARIO DE ACTIVIDADES

	Título	Tipo ¹	Responsable	Participantes	Fecha
0	Espacio Wiki del proyecto y Sitio Web	Web	Coordinador	Todos	T0+1
1	Implementación de sitios	Hardware	INAOE	Todos	T0+4
2	Conexión de sitios	Hardware	UATx	Todos	T0+6
3	Manual técnico de los sitios de la Grid	Documento	UDLA	UDLA, INAOE, UATx	T0+7
4	Mega-bases de datos: creación y acceso	Software	INAOE	UDLA-INAOE	T0+8
5	Biblioteca digital de documentos (colección inicial)	Software	INAOE	Todos	T0+5
6	Motor de búsqueda y clasificación de documentos	Software	INAOE	Todos	T0+8
7	Manual técnico de la biblioteca digital	Documento	INAOE	Todos	T0+10
8	Plataforma de ejecución de experimentos	Software	UATx	Todos	T0+8
9	Manual técnico de plataforma de ejecución	Documento	UATx	UATx-UDLA	T0+10
10	Mini-Grid	Sw/Hw	UDLA	Todos	T0+12
11	Talleres de uso de la mini-Grid	Seminario	UATx	Todos	T0+8, T0+10, T0+12
12	Reporte final	Documento	Coordinador	Todos	T0+12
13	Demostración de la mini-Grid	Software	Coordinador	Todos	T0+8, T0+10, T0+12

Programa de actividades



Caleendario de actividades

¹ Software, publicación, sitio web, presentación.

ANEXO II: EJEMPLO DE UNA TABLA DE LA MEGA BASE DE DATOS

