

Técnicas de modelado y simulación en sistemas de HPC y salud.

Diego Encinas^{1,2}, Jimena Jara¹, Román Bond¹, Daniel Rosatto¹, Lucas Maccallini¹, Mauro Gomez¹, Federico Montes de Oca¹, Adriana Gaudiani³, Martín Morales^{1,4}

¹Proyecto de Investigación SimHPC - Programa TICAPPS - Instituto de Ingeniería y Agronomía - UNAJ

²Instituto de Investigación en Informática LIDI (III-LIDI) - Facultad de Informática - UNLP - Centro Asociado CIC

³Área de Computación - Instituto de Ciencias - UNGS

⁴Centro CodApli - Facultad Regional La Plata - UTN

dencinas@unaj.edu.ar, elchejime@gmail.com, rbond@unaj.edu.ar, drosatto@unaj.edu.ar, lucas.maccallini@gmail.com, mauro.f.gmz@gmail.com, federicomdo97@gmail.com, agaudiani@ungs.edu.ar, martin.morales@unaj.edu.ar

Resumen

El objetivo de esta línea de investigación es el estudio de diferentes técnicas de modelado y simulación para entornos de Cómputo en Altas Prestaciones (HPC, High Performance Computing). El enfoque del estudio es la obtención de herramientas que permitan predecir la eficiencia del sistema ante posibles escenarios y reconfigurar el sistema físico. Además, se analizan los diferentes componentes del sistema que pueden influir en las prestaciones significativamente y pueden llegar a modelarse y/o reconfigurarse.

Por otra parte, se ha llevado a cabo el desarrollo de un simulador para entornos en el área de salud, en el sector de emergencias hospitalarias y de propagación de enfermedades.

Palabras clave: *Arquitecturas Multiprocesador. Simulación. Sistema E/S paralela. Modelado y Simulación basado en agentes (Agent-Based Modeling and Simulation, ABMS). Cloud Computing. CloudSim. Simulación y Salud.*

Contexto

Se presenta una línea de Investigación que es parte del Proyecto de Investigación “Simulación, Computación de Altas Prestaciones (HPC) y

optimización de aplicaciones sociales – SimHPC” de la Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ), acreditado por resolución interna 183/21. Además, el proyecto aporta al Programa “Tecnologías de la información y la comunicación (TIC) en aplicaciones de interés social” – TICAPPS de la UNAJ.

En el tema existe un convenio de colaboración en actividades de Investigación y Postgrado con el Instituto de Investigación en Informática – LIDI de la Universidad Nacional de La Plata y el Área de Computación del Instituto de Ciencias de la Universidad Nacional de General Sarmiento.

Introducción

El crecimiento sostenido en la demanda del poder de cómputo remarca la necesidad de sistemas con enfoques de paralelización masiva y cómputo de alta performance (HPC, High Performance Computing) [1]. Los clusters se han convertido en uno de los enfoques principales para lograr paralelismo a bajo costo. Una noción extendida lo constituye la utilización de grid computing y más recientemente cloud computing. Independientemente de la solución, estos sistemas constan de un gran número de componentes incluyendo nodos de

procesamiento, bancos de memoria, discos, entre otros.

En cuanto a las herramientas de simulación para Cloud Computing, CloudSim es un framework desarrollado en Java que provee las APIs necesarias para que el usuario genere una simulación de un Data Center funcionando como servidor de nube capaz de simular la ejecución de CloudLets.

Por otra parte, los servicios de urgencias hospitalarias son considerados como una de las unidades del sistema sanitario de mayor complejidad y fluidez, lo que unido a la variabilidad de su actividad da lugar a que su gestión operativa sea una tarea muy complicada [2]. Es por ello que resultaría de mucha utilidad para sus responsables disponer de un sistema de ayuda a la toma de decisiones (Decision Support System-DSS) tan flexible como un simulador, que permitiría tomar medidas disponiendo de información suficiente sobre las alternativas posibles.

Sistemas de E/S Paralela

Las exigencias en los sistemas de E/S paralelos se han incrementado debido al aumento en número, velocidad y potencia de las unidades de procesamiento en los clusters. También las aplicaciones científicas que utilizan cómputo de altas prestaciones acrecientan estos requerimientos.

En muchos casos, el cuello de botella de los sistemas paralelos es la E/S a causa de las exigencias que debe afrontar [3]. La E/S Paralela es esencial para emparejar el avance de las arquitecturas de los procesadores y el rápido crecimiento de la capacidad computacional. Aunque la arquitectura jerárquica de memoria multinivel puede evitar grandes pérdidas de prestaciones debido a los retardos de acceso a disco, la capacidad de memoria es limitada. Además, como la capacidad computacional aumentará, la disponibilidad de memoria por core decrecerá, especialmente si la escala de los sistemas de HPC se proyecta a millones de cores o más. Varias simulaciones científicas y de ingeniería de áreas críticas de investigación, tales como la nanotecnología, astrofísica, clima y energía física están convirtiéndose en aplicaciones intensivas de datos. Para poder disminuir la brecha entre CPUs-E/S se deben

identificar los factores que influyen en las prestaciones y proponer nuevas soluciones [4] [5].

En el área de tolerancia a fallas en sistemas de cómputo de alta prestaciones se puede notar la importancia de la unidad de E/S en las arquitecturas paralelas como un punto a mejorar para lograr cubrir las exigencias de las aplicaciones que utilizan HPC. Una manera de llevar a cabo este trabajo es utilizar técnicas de simulación para evaluar el efecto de los cambios de los factores con mayores influencias en las prestaciones del sistema de E/S paralelo.

Se puede disminuir la complejidad y la probabilidad de errores en la generación de sistemas híbridos desarrollando una simulación específica de éstos utilizando diferentes frameworks [6] [7] [8].

Las aplicaciones científicas con un uso intensivo de datos utilizan software de E/S paralelo para acceder a archivos. Contar con una herramienta que permita predecir el comportamiento de este tipo de aplicaciones en HPC es de gran utilidad para los desarrolladores de aplicaciones paralelas como para administradores de centros de cómputo. Por otro lado, ABMS ha sido utilizado para modelar problemas y sistemas complejos en diversas áreas de la ciencia.

Evaluar las prestaciones del subsistema de E/S con diferentes configuraciones y la misma aplicación, permite adaptar la configuración de E/S teniendo en cuenta el patrón de acceso de la aplicación. Pero también puede ser una gran ventaja analizar las necesidades de las aplicaciones antes de configurar el sistema físico. Una manera de predecir el comportamiento de las aplicaciones en el sistema de cómputo, ante distintas configuraciones, es utilizando técnicas de modelado y simulación.

Se está desarrollando modelos e implementando una simulación de la arquitectura de E/S paralela, por medio de técnicas de simulación basadas en agentes o Sistemas Multi-Agente, (MAS-MultiAgentSystems), para evaluar el efecto de dimensionar el sistema de E/S o cambiar componentes como la red de almacenamiento, dispositivos de E/S, entre otros [9].

Simulación de arquitecturas de Cloud Computing

CloudSim [10] [11] es un Framework de simulación generalizado y extensible que permite el modelado y la simulación de diferentes infraestructuras y servicios de aplicaciones de Cloud Computing. Un ejemplo de utilización es la simulación de muchos centros de datos.

Su arquitectura consiste en entidades específicas que se representan como clases Java que pueden ser heredadas o instanciadas. Estas clases representan centros de datos, hosts físicos, máquinas virtuales, servicios a ejecutar en los centros de datos y servicios en la nube de usuarios [12] [13]. Además, CloudSim soporta la inserción dinámica de los elementos de simulación y proporciona aplicaciones de paso de mensajes y la topología de la red del centro de datos.

La versatilidad de CloudSim es la principal ventaja del sistema. La integración de nuevos parámetros y conceptos de la simulación es implementada desde abstracciones preestablecidas convenientemente por los autores. Las abstracciones principales son SimEvent [14], SimEntity [15], DataCenterCharacteristics y Vm.

El aporte de un desarrollo de nuevos actores al componente Vm (Virtual Machine) posibilita que por medio de simulación se obtengan métricas de entrada/salida. Las estadísticas que aporta la nueva implementación de Vm dan soporte a un espacio de memoria ram en tiempos de simulación. Dicho espacio de memoria principal está controlado por otro componente que es capaz de procesar instrucciones guardadas en el espacio de memoria sintético denominado RamEntity. Si las instrucciones se guardan lógicamente, la nueva versión de Vm es capaz de administrar procesos en la nueva capa de ejecución. La idea general de la implementación consiste en la creación de una nueva SimEntity y sus agregaciones necesarias para manipular el espacio de memoria proporcionada por RamEntity, en tiempos de simulación. De tal forma que cada celda de RamEntity no sólo guarda datos, sino que también es posible que mantenga objetos interpretables como eventos para la nueva SimEntity que se denomina InitEntity.

Lo destacable es que el entorno de la cola de procesos es en el espacio de memoria de RamEntity y que cada instrucción que compone a un código objeto del proceso es en realidad un evento con todos sus parámetros.

Simulación y Salud

Al analizar las necesidades presentes en los servicios de salud, se obtiene que dentro de una sala de urgencias se encuentre una gran diversidad de escenarios posibles donde cada uno de estos puede afectar a resultados sensibles como, por ejemplo, la tasa de mortalidad de personas. Para solucionar este problema se desarrolló un simulador con el objetivo de ser una herramienta capaz de recrear una gran cantidad de escenarios y así poder tomar decisiones rápidas.

El simulador desarrollado se centra en la prevalencia puntual de infecciones intrahospitalarias [16] en una sala de urgencias y cómo la afectan distintos factores relacionados con la gestión hospitalaria.

Para llevar a cabo el modelado del simulador se utilizó el paradigma de Modelado y Simulación basado en Agentes (ABMS). El framework utilizado es Repast Symphony [17], una herramienta especializada en ABMS, la cual provee una serie de ventajas respecto al modelado e implementación de agentes, así como también la coordinación concurrente de los agentes.

De esta manera, se clasificaron distintos agentes intervinientes en el ambiente de una sala de urgencias, como los pacientes y médicos, entre otros. Dichos agentes definen su comportamiento mediante máquinas de estado, las cuales determinan las acciones correspondientes tanto a la atención hospitalaria como también al estado de salud respecto de una enfermedad intrahospitalaria específica.

La propagación de la infección intrahospitalaria estará modelada mediante interacciones entre estos agentes, por ejemplo, uno de los focos de infección más importante de las salas de urgencias son las salas de espera. La forma más efectiva para calibrar el simulador se da mediante el grado de interacción de agentes, ajustando así la tasa de transmisión de la enfermedad en cuestión.

Una vez calibrado el simulador, se pueden obtener resultados. El trabajador de la salud dispone de diversos parámetros para configurar la simulación, por ejemplo, la cantidad de pacientes, la cantidad de camas disponibles, la cantidad de insumos hospitalarios, etc. Al realizar distintas ejecuciones, se pueden obtener resultados analizando distintos posibles cuellos de botella, configurando la cantidad de médicos clínicos disponibles, la cantidad de recepcionistas encargados de la admisión, el triage, entre otros. De esta manera, es posible la toma de decisiones respecto a la asignación de recursos y personal para agilizar la estancia hospitalaria de los pacientes y evitar los contagios producidos por sus interacciones.

Además, se analiza y trabaja la optimización y paralelización del simulador con los ambientes Repast HPC para clusters y Flame para ejecución sobre GPU, obteniendo mejor performance en términos de tiempos.

Líneas de Investigación, Desarrollo e Innovación

Temas de Estudio e Investigación

- Arquitecturas multiprocesador para procesamiento paralelo: multiprocesador de memoria compartida, multiprocesador on-chip de memoria distribuida. Multicore, Clusters, Clusters de multicore. Grid. Cloud.
- Arquitectura de E/S paralela considerando el software, hardware, comunicaciones entre módulos y dispositivos de almacenamiento.
- Nuevos aportes de desarrollos que mejoren los modelos de simulaciones con CloudSim para el análisis de la performance en sistemas de arquitecturas de software de Cloud Computing.
- Modelado y simulación para la administración de sistemas de salud.

Resultados y Objetivos

Investigación experimental

- Diseño y desarrollo de modelos mediante técnicas de Modelado y simulación basada en agentes (ABMS) para analizar el

comportamiento de las distintas capas de la pila de software de E/S.

- Análisis, modelado e implementación de las operaciones típicas de E/S: read, write, open, close, flush.
- Análisis y modelado de librerías de archivos para aplicaciones que utilizan cómputo de altas prestaciones-HPC. Se ha utilizado Amazon Web Services para creación de cluster virtuales y obtener métricas de la pila de software de E/S.
- Incorporación de tiempos de entrenamiento, obtenidos en AWS, en el simulador. Con esto se logra una salida más detallada y un método para validar tiempos y métricas del simulador con AWS.
- Implementación de comandos para ejecutar desde command center en NetLogo. Con esto se logró sintetizar el benchmark IOR correspondiente a la capa de aplicación de la pila de E/S, logrando introducir nuevos parámetros como tamaño de archivo y cantidad de nodos de E/S (metadata server y data server). De ejecutar este comando, se obtiene una nueva salida similar a la del benchmark IOR [18].
- Obtención de un método de desarrollo de nuevos actores genéricos CloudSim que mejoran el modelado y la producción de estadísticas virtuales.
- Implementación de la entidad InitEntity que procesa instrucciones en el espacio de memoria de las máquinas virtuales. Se vinculan exitosamente los tiempos de procesamiento de un cloudlet y las instrucciones en las máquinas virtuales [19].
- Contraste de una simulación de un cluster en la nube y uno idéntico desplegado en un sistema de cloud computing público [20].
- Modelado de infraestructuras de sistemas de salud.
- Implementación de un simulador para analizar el contagio de enfermedades intrahospitalarias [21].
- Paralelización en la ejecución de simuladores.
- Implementación de un simulador para analizar la propagación de enfermedades [22].

Formación de Recursos Humanos

Dentro de la temática de la línea de I/D se participa en el dictado de la carrera de Ingeniería en Informática de la UNAJ. También aportan trabajos de alumnos de las materias Redes de Computadoras 2 y Programación en Tiempo Real. Por otro lado, algunos integrantes participan en el dictado de la Diplomatura en Ciencia de Datos de la UNAJ.

Durante 2021 se han realizado publicaciones nacionales e internacionales. Además, se encuentran en desarrollo y concluidas varias Prácticas Profesionales Supervisadas (PPS) con las que concluyen sus estudios los alumnos de Ingeniería en Informática.

En esta línea de I/D existe cooperación a nivel nacional e internacional. Hay dos investigadores realizando estudios de postgrado, 1 becario EVC CIN, un becario de Iniciación a la Investigación UNAJ y 2 alumnos avanzados de grado colaborando en las tareas.

Referencias

1. Grama A, Gupta A, Karypis G, Kumar V. "Introduction to parallel computing". Second Edition. Pearson Addison Wesley, 2003.
2. R. Galeano, C. Villalba, D. Rexachs, E. Luque. Agent-Based Model to Simulate Outpatient's Consultations at the "Hospital de Clínicas". The Eighth International Conference on Advances in System Simulation (SIMUL 2016). 1:46-51
3. H Hennessy, J. L., Patterson, and D. A., Computer Architecture, Fourth Edition: A Quantitative Approach. San Francisco, CA, USA: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2006.
4. J. M. May, Parallel I/O for high performance computing. San Francisco, CA, USA: Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2001.
5. V. Balaji, Earth system modelling – Volume 4. IO and Postprocessing. Springer, 2013.
6. D. Encinas, Utilización de un reloj global para el modelado de un ambiente simulado distribuido. XVIII Congreso Argentino de Ciencias de la Computación. 2012
7. D. Encinas, Simulación de una red CAN para dimensionar las comunicaciones de una IMU. VII Congreso Argentino de Tecnología Espacial. 2013.
8. D. Black, SystemC: From the Ground Up. Second Edition, Springer, 2010.
9. D. Encinas et al., Modeling I/O System in HPC: An ABMS Approach. The Seventh International Conference on Advances in System Simulation (SIMUL), ISBN: 978-1-61208-442-8, 2015.
10. R. Calheiros, R. Ranjan, A. Beloglazov, C. De Rose and R. Buyya "CloudSim: a toolkit for modeling and simulation of cloud computing environments and evaluation of resource provisioning algorithms" Published online 24 August 2010 in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com). DOI: 10.1002/spe.995.
11. <http://www.cloudbus.org/cloudsim> 2018.
12. Hamza Ouarnoughi, Jalil Boukhobza, Frank Singhoff, Stephane Rubini, Erwann Kassis. "Considering I/O Processing in CloudSim for Performance and Energy Evaluation". OpenStack Cloud Software: Open source software for building private and public clouds. © Springer International Publishing AG 2016 M. Tauber et al. (Eds.): ISC High Performance Workshops 2016, LNCS 9945, pp. 591–603, 2016. DOI: 10.1007/978-3-319-46079-6_40.
13. Kushang Parikh, Nagesh Hawanna, Haleema. P.K, Jayasubalakshmi.R and N.Ch.S.N.Iyengar. School of Computing Science and engineering Vellore Institute of Technology, Tamil Nadu, "Virtual Machine Allocation Policy in Cloud Computing Using CloudSim in Java." 2015.
14. www.icsa.inf.ed.ac.uk/research/groups/hase/simj ava 2018.
15. F. Howell, R Mc Nab. A discrete event simulation library for java. International Conference on Web-Based Modeling and Simulation. 1998.
16. Prevalencia puntual de infección nosocomial, disponible en internet: https://www.researchgate.net/publication/242363760_Prevalencia_puntual_de_infeccion_nosocomial. Fecha: 29/03/2020
17. Repast Symphony Frequently Asked Questions, disponible en internet: <https://repast.github.io/docs/RepastFAQ/RepastFAQ.html>. Fecha: 29/03/2020
18. D. Encinas, S. Mendez, M. Naiouf, A. De Giusti, D. Rexachs del Rosario, and E. Luque, An Agent-Based Model for Analyzing the HPC Input/Output System International journal on advances in systems and measurements vol. 13, num. 3 & 4, págs. 192-202, 2020.
19. D. Rosatto, R. Bond, M. Belizán, M. Morales, D. Encinas. Modelado y simulación de arquitecturas de Cloud Computing con CloudSim: comunicación entre entidades. XXIII Congreso Argentino de Ciencias de la Computación. ISBN 978-950-34-1539-9. 2017
20. T. Rosales, J. Spinelli, M. Di Nardo, R. Bond, D. Rosatto, D. Encinas, F. Romero. Análisis de una plataforma de simulación para Cloud Computing. Un caso de estudio. XXVI Congreso Argentino de Ciencias de la Computación. 2020
21. L. Maccallini, D. O. Encinas, and F. Romero. "An Approach to the Modeling and Simulation of Intra-Hospital Diseases". Journal of computer science and technology (ISSN 1666-6038), vol. 21, num. 2, págs. 157-169, doi. 10.24215/16666038.21.e14, 2021.
22. J. Baez, A. Barreto, B. Galarza, M. Morales, D. Encinas. Simulación para estimar propagación de enfermedades. 8º Congreso Nacional de Ingeniería Informática/Sistemas de Información (CoNaIISI 2020). San Francisco, Córdoba. 2020