

ISSN 2594-8997

Vol. 1, nº8

Agosto de 2018



# LNCC

*otícias*

[www.lncc.br](http://www.lncc.br)

# LNCC

## Notícias

### **Apresentação**

O **LNCC Notícias** é um boletim digital online, de acesso público e periodicidade mensal, para divulgar as atividades e notícias do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/MCTIC).

A reprodução parcial ou total das notas é autorizada, desde que acompanhada das devidas referências e créditos da publicação, indicando o link para a página.

### **Expediente**

**Diretor:** Augusto César Gadelha Vieira

**Diretor Substituto:** Wagner Vieira Léo

#### **Coordenação de Gestão e Administração – COGEA**

Coordenadora - Anmily Paula dos Santos Martins

#### **Área de Comunicação Social do LNCC - ARCOS**

Responsável pela ARCOS e pelo LNCC Notícias: Genilda Roli

Diagramação e *design*: Matheus B. de Mendonça

Secretária: Tathiana Tapajós

Redação: Camila Tavares

**Programação Web: Coordenação de Tecnologia da Informação e Comunicação (COTIC)**

Serviço de Suporte de Sistemas e Redes

**Redação do Informativo: Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC - Sala 2D10**

Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha - Petrópolis - Rio de Janeiro - Brasil - CEP: 25651-075

Contatos: Tel.: +55 (24) 2233 6240 | E-mail: [arcos@lncc.br](mailto:arcos@lncc.br)

## LNCC REALIZA A ESCOLA DE INVERNO SUPERCOMPUTADOR SANTOS DUMONT



No dia 1º de agosto, o LNCC iniciou a Escola de

paralela no SDUMONT", "Introdução à programação CUDA", "Introdução ao uso de containers em computação de alto desempenho", "Introdução à programação paralela de aceleradores em OpenCL", "Introdução à programação em aceleradores com diretivas", "Introdução a programação com MPI", "Introdução à Intel Parallel Studio XE", "Introdução à programação MPI com extensões para E/S (MPI-IO)", "Introdução a Programação Paralela/ OpenMP" e "R em ambiente HPC", "Introdução à programação paralela e vetorial em arquiteturas Intel Xeon Phi".

Dentro desta programação, no dia 6 de agosto, Leonardo Fialho da Big Data Systems – R&D ARM Software Lab da ATOS deu a palestra "ARM em HPC – utilizando processadores ARM para computação de alto desempenho. A ATOS é a fabricante do Supercomputador SDumont instalado no LNCC.

A Escola de Inverno conta com a colaboração da UFRGS, com o patrocínio da ATOS e do PROEX LNCC e, ainda, com o apoio do CNPq, Capes, EXAFLOP, INTEL e da NVIDIA. Está prevista para 2019 uma nova edição da Escola de Inverno.

Inverno Supercomputador Santos Dumont 2018, que tem como objetivo oferecer à comunidade de usuários do SDumont minicursos sobre ferramentas de perfilagem, modelos de programação e linguagens para o desenvolvimento de algoritmos paralelos otimizados. Com todas as vagas preenchidas, totalizando 40 inscritos por minicurso, os participantes vindos de diversos Estados do País participam de uma extensa programação que inclui minicursos sobre "Introdução ao Linux para processamento de alto desempenho", "C para Programação Paralela", "Fortran para Programação Paralela", "Introdução ao ambiente SDUMONT /SLURM e ferramentas BULLX-DE", "Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision: an introduction", "Introdução à E/S



Foto: Matheus Mendonça



Leonardo Fialho ministra palestra sobre ARM em HPC  
Foto: Carla Osthoff



## LNCC OFERECE AO PÚBLICO COLÓQUIOS E SEMINÁRIOS NO MÊS DE AGOSTO

palestras em temas relevantes de pesquisadores e personalidades com destacada atuação no cenário nacional e internacional em Ciência & Tecnologia.

"Multilevel Optimization and Parallel Evolutionary Algorithms". Os colóquios e palestras são gratuitos e abertos ao público em geral. Para mais informações acesse o link "Eventos" no site do LNCC ([www.lncc.br](http://www.lncc.br)). Assista aos vídeos das palestras disponíveis no endereço do LNCC no Youtube: <https://www.youtube.com/channel/UCD5S2EfH6z0SKeO1YCNztzg/videos>



## PESQUISADORA DO LNCC VISITA MAIOR SUPERCOMPUTADOR DO MUNDO POR QUATRO EDIÇÕES DO TOP500

A pesquisadora do LNCC, Carla Osthoff visitou o "Centro Nacional de Supercomputação Wuxi" onde está localizado o Supercomputador Sunway TaihuLight que foi classificado como o de mais alto desempenho do mundo por quatro edições seguidas da a lista TOP500 (<https://top500.org>), passando para o segundo lugar na edição de junho de 2018. Ele foi desenvolvido pelo Centro Nacional de Pesquisa de

No dia 6 de agosto, o LNCC deu início aos "Colóquios LNCC" com a palestra "Ciência, Tecnologia e Inovação para o desenvolvimento nacional", do Deputado Federal ex-ministro da Ciência, Tecnologia e Inovação, Celso Pansera (PT/RJ). A palestra destacou os principais fatores, na visão do palestrante, para a solução da crise que o país

No ciclo de seminários da Pós-Graduação, no dia 13 de agosto, Renato S. Silva, da Coordenação de Modelagem Computacional (COMOD/LNCC) falará sobre "Quantificação de Incertezas". No dia 20, Nikiforos Philyppis Jr., da Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), abordará o tema "Processos de aprendizagem e ferramentas para estudo e fixação de conceitos e ideias - descobertas da Neurociência".



Celso Pansera, Deputado Federal e Ex-ministro, ministra palestra no "Colóquios LNCC"  
Foto: Tathiana Tapajóz

atravessa e as recentes ações no setor de Ciência, Tecnologia e Inovação. Os "Colóquios LNCC" tem o objetivo de oferecer

E no dia 27, Helio J. C. Barbosa, da Coordenação de Modelagem Computacional (COMOD/LNCC) ministrará palestra com o título

Engenharia e Tecnologia de Computadores Paralelos da China (NRCPC) com capacidade de 93,01 Petaflops (quatrilhões de operações por segundo).

na lista TOP500, com 206 supercomputadores, seguido em segundo lugar pelos Estados Unidos com 124 supercomputadores.

dentro da classificação do "CORE Conference Portal", e classificado com Qualis A1 pela Capes (o Qualis é o sistema de avaliação de periódicos, mantido pela Capes, para estratificação da qualidade da produção intelectual dos programas de pós-graduação, onde A1 é o mais elevado).

Neste evento, a pesquisadora Osthoff apresentou o trabalho "An OpenMP implementation of the TVD-Hopmoc method based on a synchronization mechanism using locks between adjacent threads on Xeon Phi accelerators" fruto da colaboração com os pesquisadores, Sanderson L. Gonzaga de Oliveira, da Universidade Federal de Lavras, Diego Brandão do CEFET-RJ e Maurício Kischinhevsky da UFF.

A colaboração, chamada de "Pesquisa e desenvolvimento de otimizações e modernização de código para métodos numéricos de diferenças finitas para solução de equações diferenciais parciais em arquiteturas paralelas híbridas", possui apoio do projeto PCI/LNCC através do bolsista Frederico Luis Cabral e do projeto PIBIC/LNCC, através do bolsista de Iniciação Científica Gabriel Costa. Apenas este ano, a pesquisa desenvolvida no âmbito desta



Entrada do Centro Nacional de Supercomputação em WuXi | Fotos: Carla Osthoff

O Supercomputador mais rápido do mundo, na edição de junho 2018 da lista TOP500, passou a ser o SUMMIT localizado no Oak Ridge National Laboratory (ORNL) do Departamento de Energia (DOE/EUA), possuindo o desempenho de 122.3 Petaflops. Porém, a China se mantém como a nação que possui o maior número de supercomputadores

A visita fez parte da programação do evento "International Conference on Computational Science" (<https://www.iccs-meeting.org/iccs2018>), que é um dos eventos internacionais mais importante da área de pesquisa de computação científica e internacionalmente considerado com uma "A-rank conference"

colaboração gerou também o trabalho “A total variation diminishing Hopmoc scheme for numerical time integration of evolutionary differential equations”, publicado no “The 18th International Conference on Computational Science and Its Applications” (ICCSA 2018), (<http://www.iccsa.org/>), classificado como Qualis B1 pela CAPES, e o trabalho “A total variation diminishing Hopmoc scheme for numerical time integration of evolutionary differential equations”, que foi aceito para publicação no “Latin American High-Performance Computing Conference” (CARLA 2018), classificado como Qualis B4 pela CAPES, que é o evento da área de Supercomputação mais importante da América Latina e Caribe e um dos eventos internacionais mais importante da área de Supercomputação.



A pesquisadora Carla Osthoff em frente ao Sunway TaihuLight



Apresentação do Supercomputador Sunway TaihuLight

- 立足江苏
- 面向长三角
- 辐射全国

**主要应用领域：**

气候气象  
工业设计  
油气勘探  
信息安全  
金融分析  
生物医药  
海洋科学  
动漫渲染  
现代农业  
医疗服务



## LNCC PARTICIPA DA 70ª REUNIÃO ANUAL DA SBPC EM ALAGOAS



A 70ª Reunião Anual da SBPC, realizada pela Sociedade Brasileira para o Progresso da Ciência, de 22 a 28 de julho, contou com mais de 250 atividades que aconteceram nos auditórios da Universidade Federal de Alagoas (UFAL) e nos estandes da ExpoT&C, SBPC Jovem, SBPC Cultural e SBPC Afro e Indígena, envolvendo, de acordo com a organização do evento, mais de 12 mil pessoas, entre participantes inscritos e visitantes, de todas as regiões do País.

O Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) participou mais uma vez da SBPC no estande, situado na ExpoT&C, reservado para a exposição dos trabalhos dos Institutos e das Agências do Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações (MCTIC), dentro da temática das Tecnologias da Informação e Comunicação (TICs).



Ministro Gilberto Kassab visita o estande do LNCC em companhia do Diretor Substituto do LNCC, Wagner Leo, e do pesquisador visitante do LNCC, Paulo Ziemer.



Sandra Malta, Pesquisadora do LNCC, ministra palestra sobre "A Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC". | Fotos: Tathiana Tapajóz/LNCC

Durante a programação o LNCC ofereceu palestras com os temas "Computação Científica Distribuída de Alto Desempenho como Serviço" com Bruno Schulze (LNCC), "Computação Científica Aplicada na Saúde" com Paulo Ziemer (LNCC), "Por que precisamos de Redes Inteligentes de Abastecimento e Distribuição com Segurança e Privacidade?" com Fábio Borges (LNCC), "A Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC" com Sandra Malta (LNCC),

"Supercomputador Santos Dumont e os desafios da pesquisa em Computação Científica no Brasil" com Carla Osthoff (LNCC), "Computação Científica" com Mariza Ferro; e ainda Isabella Alves Guedes que falou sobre "DockThor-VS: portal gratuito para triagem virtual no processo de descobrimento de fármacos utilizando o supercomputador Santos Dumont. O ministro da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações, Gilberto Kassab, visitou o estande

## TRABALHO SOBRE MODIFICAÇÃO DE TRANSPARÊNCIA DE MATERIAL, REALIZADO COM RECURSOS DO SUPERCOMPUTADOR SDUMONT, É PUBLICADO NA REVISTA SCIENCE

André Farias de Moura (Universidade Federal de São Carlos) e Nicholas Kotov (University of Michigan), e levou cerca de três anos para ser finalizada.

O principal objetivo da investigação era obter um material que pudesse ter a sua transparência modificada durante o uso e que essa modificação fosse controlável e reversível. Normalmente, o grau de transparência de um material é definido no momento em que ele é produzido, não podendo ser modulado em uso. Obviamente, isso cria uma dificuldade para aplicações que necessitam de uma alternância entre o opaco e o transparente, como no caso da holografia 3D em tempo real, em que voxels de uma paleta de cores variada precisam alternar entre os estados opaco e transparente para produzir as imagens no volume. Mais do que isso, deseja-se que esta variação seja gradual, o que permitiria gerar imagens com alta qualidade de detalhes e nuances.

Com estas aplicações em mente, o grupo experimental do professor Nicholas Kotov escolheu, como sistema para realizar a prova de conceito, um material já bastante conhecido por suas propriedades magnéticas: o espínélio de óxido



No estande do LNCC, crianças montam quebra-cabeças com imagem do Supercomputador Sdumont.

Publicado recentemente na Revista Science, uma das revistas acadêmicas mais prestigiadas do mundo, o artigo "Chiral magnetic nanoparticles and gels" mostra a importância da pesquisa conjunta de grupos teóricos e experimentais para o desenvolvimento de novas tecnologias. A pesquisa foi desenvolvida em paralelo pelos grupos liderados pelos professores



de cobalto. A novidade consistiu em agregar uma nova propriedade a este material, a quiralidade. O exemplo mais acessível de quiralidade é dado pelas mãos, que classificamos como direita e esquerda e reconhecemos que elas são semelhantes em muitos aspectos, mas diferem no fato de que a mão esquerda é a imagem o espelho da mão direita.

Na verdade, a vida na biosfera terrestre é formada por moléculas de quiralidade bem definida, e uma destas moléculas, o amino ácido cisteína foi a escolha do grupo experimental para tornar as nanopartículas de óxido de cobalto quirais. Mas qual é a vantagem de adicionar a propriedade de quiralidade a este material magnético? O fato de que as nanopartículas são magnéticas já permite modificar a transparência por meio de um campo magnético, mas se além de magnéticas elas forem quirais é possível ter um grau de controle maior e mais fino da modificação de transparência pelo campo magnético. De fato, esta habilidade de controlar a transparência do material foi demonstrada experimentalmente, e nesse ponto entrou a simulação computacional, buscando responder os porquês de haver

essa modificação, quando combinados o magnetismo do material com a quiralidade.

A modelagem computacional somente foi possível graças aos recursos computacionais do supercomputador Santos Dumont (SDumont), que está localizado na sede do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), em Petrópolis-RJ. O SDumont possui capacidade instalada de processamento na ordem de 1,1 Petaflop/s (1,1 x 10<sup>15</sup> float-point operations per second), um total de 18.144 núcleos de CPU, tendo sido utilizados nesta pesquisa 1.200 núcleos de processamento, por cerca de 45 dias seguidos!

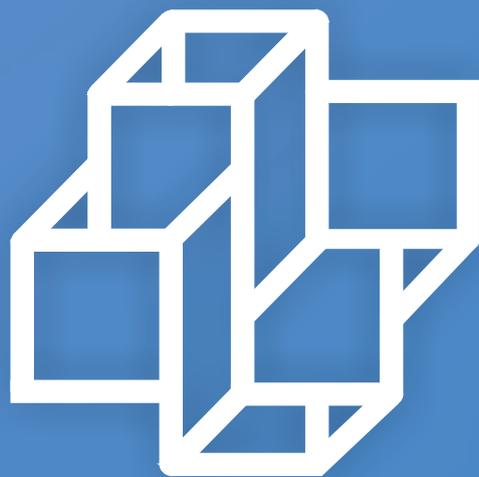
Dado o tipo de problema, foram realizados diversos cálculos quânticos para modelos deste material, contendo quase 200 átomos e mais de 1.300 elétrons. Este tamanho de sistema é muito superior ao encontrado na literatura, principalmente utilizando métodos considerados de alta qualidade (e alto custo computacional).

Mas o que os modelos conseguiram demonstrar? O principal papel da modelagem computacional é mostrar detalhes que não podem ser vistos por técnicas experimentais, então o grupo teórico forneceu uma descrição detalhada de como a

molécula de cisteína se liga à nanopartícula deste material cerâmico. Isso é fundamental para as investigações futuras em sistemas semelhantes, pois as ideias gerais que foram obtidas, a partir das simulações, mostraram que outras moléculas quirais podem ter o mesmo efeito e que outras nanoestruturas de materiais magnéticos também podem ser usadas para aplicações em que o controle de transparência seja crítico. Assim, o investimento feito nesta investigação teórico-experimental deve permitir que as novas pesquisas neste tipo de material funcional sejam mais rápidas e mais baratas.

O artigo está disponível no seguinte endereço eletrônico: <http://science.sciencemag.org/content/359/6373/309>





# LNCC

otícias



Foto: Matheus B. de Mendonça

[www.lncc.br](http://www.lncc.br)