



• LNCC •

UNIDADE DE PESQUISA DO MCTIC



Vista panorâmica do campus do LNCC

O LNCC

Desde sua criação em 1980 o Laboratório Nacional de Computação Científica tem como atividades precípuas a pesquisa, o desenvolvimento e a formação de recursos humanos em Computação Científica, assim como implantar, manter e disponibilizar à comunidade científica de todo o país uma plataforma computacional de alto desempenho. Sua origem se identifica com a atuação de grupos de pesquisadores com interesse em pesquisar, desenvolver e aplicar metodologias matemáticas e computacionais na solução de problemas multidisciplinares originados de mais diversas áreas, notadamente, das Engenharias, Física, Biologia, Ciências Sociais e na percepção da importância que a Computação Científica então assumia tanto no suporte à pesquisa científica e tecnológica em diversas áreas, como representando uma nova metodologia de se fazer ciência. Em 2000 começaram a ser desenvolvidas no LNCC aplicações da Computação Científica na Bioinformática e em Medicina, com a criação dos laboratórios LABINFO – Laboratório Nacional de Bioinformática, com uma unidade de Genômica Computacional, e o HeMoLab – Laboratório de Modelagem em Hemodinâmica. Atualmente, as atividades de pesquisa e desenvolvimento do LNCC estão centradas em duas coordenações, a de Métodos Matemáticos e Computacionais e a de Modelagem Computacional, agregando pesquisadores nas linhas de pesquisa em: métodos numéricos e algoritmos; modelagem computacional de sistemas complexos; sistemas, controles e sinais; computação de alto desempenho; ciência de dados; biologia computacional. Projetos de aplicações são desenvolvidos em diversas áreas, notadamente, em bioinformática; na

medicina assistida por computação científica; fenômenos de transporte; reservatórios de petróleo, água e gás; sísmica; processamento de grande massa de dados; ambientes colaborativos e multimídia; redes e computação distribuídas.

Ao longo de sua história, o LNCC tem disponibilizado, como Laboratório Nacional, o uso compartilhado de sua plataforma computacional de alto desempenho para toda a comunidade científica e tecnológica do país. A aquisição do supercomputador Santos Dumont em 2015 representou um marco fundamental para o desenvolvimento da computação de alto desempenho no Brasil. No início de 2016, o Santos Dumont iniciou sua operação, sendo disponibilizado à toda comunidade científica do país que passou a contar com uma alta capacidade de processamento para a solução de problemas complexos que envolvem grande número de cálculos numéricos e de manipulação de dados.

Com a criação do programa de pós-graduação em Modelagem Computacional no ano 2000, o Laboratório passou a contribuir diretamente na formação de pesquisadores com elevado grau de qualificação e perfil interdisciplinar oriundos de diferentes áreas de conhecimento. Periodicamente são realizados diversos eventos científicos, tais como: Escolas, Seminários e Workshops, além de eventos de divulgação da Ciência à sociedade através da organização de palestras e atividades, entre as quais, “O LNCC de portas abertas”, a Semana Nacional de Ciência e Tecnologia em Petrópolis e várias Visitas Técnicas de estudantes de todos os níveis.

O LNCC atua na promoção da inovação e empreendedorismos através da Incubadora LNCC. Implantou a Fundação de Apoio à Computação Científica – FACC – que hoje apoia projetos de pesquisa em todas as Unidades de Pesquisa do MCTIC no Rio de Janeiro, e está vinculado ao Núcleo de Inovação Tecnológica – NIT-Rio – assim como outras Unidades de Pesquisa do MCTIC. O LNCC coordena o INCT “Ciência dos Dados” e co-ordena o INCT “Medicina Assistida por Computação Científica”.

A Computação Científica tem por objetivo criar modelos e métodos matemáticos e computacionais para compreender, analisar e resolver problemas científicos e tecnológicos; constitui uma grande área de pesquisa interdisciplinar, fundamentada em metodologias e conhecimentos científicos advindos primordialmente da Matemática, da Física e da Computação. Seu objetivo é avançar no desenvolvimento de modelos, métodos, algoritmos e técnicas para simular condições, testar hipóteses, controlar e prever a evolução de processos e fenômenos. É alternativa cada vez mais utilizada para técnicas e observações da ciência experimental, principalmente nos casos em que as medições são impraticáveis, de alto risco ou muito custosas. Encontra aplicações em inúmeras áreas científicas e tecnológicas, pelo que transcende o universo acadêmico e alcança o governo, a indústria, o comércio, os serviços e a sociedade.

A Computação Científica foi potencializada nas últimas décadas pela notável evolução dos computadores, da ciência da computação e metodologias para processamento científico e das redes de comunicação, que proporcionaram um crescimento exponencial da capacidade de processamento e na velocidade de transmissão de dados. Essa evolução influenciou a própria forma de se fazer pesquisa científica.

Como consequência, a Computação Científica, aliada ao processamento de alto desempenho, tornou-se componente essencial nos processos de inovação científica e tecnológica e de ganho de competitividade das economias modernas. A modelagem e a simulação computacional são atualmente fundamentais para a criação de novos conhecimentos e para o desenvolvimento de produtos e serviços inovadores.

O LNCC orienta-se pelas perspectivas da relevância global e do alto valor estratégico da Computação Científica, bem como pelo seu mandato de atuar como um Laboratório Nacional disponibilizando a infraestrutura de computação de alto desempenho para o uso compartilhado com toda a comunidade de pesquisa científica e tecnológica do país. Nessa qualidade, contribui ativamente para o desenvolvimento

autônomo do País na área estratégica em que atua. O LNCC contribui significativamente para o avanço da ciência e da tecnologia, em benefício da sociedade brasileira e do desenvolvimento do país, por meio da realização de pesquisas científicas e desenvolvimentos tecnológicos em Computação Científica e suas aplicações, da formação de novos pesquisadores, da disponibilização e facilitação do uso da sua infraestrutura computacional de alto desempenho para o meio acadêmico e setor empresarial, do incentivo à inovação e da promoção e disseminação da ciência. A equipe de pesquisadores do LNCC atua na construção de modelos e métodos matemáticos e computacionais para compreender, analisar e resolver problemas científicos e tecnológicos de diversas áreas do conhecimento. Estas pesquisas buscam simular condições, testar hipóteses e prever a evolução de processos e fenômenos. As pesquisas desenvolvidas no LNCC são relevantes para a validação e o aumento da confiabilidade na análise dos fenômenos. A abrangência das áreas científicas e tecnológicas em que o LNCC atua permite desenvolver aplicações na modelagem computacional de problemas complexos em setores da indústria, comércio, serviços e governos.

Como exemplos da relevância das modelagens matemática e computacional no tratamento de problemas importantes para a sociedade mencionam-se algumas das pesquisas que o LNCC desenvolve atualmente:

- i. Sequenciamento genético e análises de bioinformática e biologia computacional de organismos importantes na área da saúde humana, por ex, os vírus Zika e Chikungunya; agropecuária e ambiental;
- ii. Modelagem do crescimento tumoral;
- iii. Modelagem de reservatórios de petróleo na região do pré-sal;
- iv. Modelagem do sistema cardiovascular humano para apoio ao diagnóstico, treinamento e planejamento de cirurgias e tratamento médico;

- v. Aplicação da ciência de redes na análise de dados massivos em setores como saúde, transporte aéreo, telefonia, entre outras;
- vi. Modelagem de sistemas moleculares, entre os quais processos de acoplamento (docking) de ligantes em estruturas de proteínas que permitem a síntese de fármacos;
- vii. Desenvolvimento de inovadores algoritmos numéricos e computacionais para as novas gerações de arquiteturas massivamente paralelas com aplicações na área de energia. O LNCC produz anualmente cerca de 200 artigos que são publicados em periódicos científicos arbitrados, resultantes de vários projetos de pesquisa, incluindo projetos em cooperações nacionais e internacionais.

Como nó principal e coordenador do Sistema Nacional de Alto Desempenho – SINAPAD – disponibiliza à comunidade científica de todo o país a capacidade petaflopica do supercomputador Santos Dumont e suporta os portais científicos do SINAPAD, dentre os quais o BioInfo e o DockThor desenvolvidos no LNCC

Na formação de recursos-humanos, o Programa de Pós-graduação do LNCC tem hoje (2017) 88 alunos matriculados, já tendo formado 145 mestres e 115 doutores desde o início do programa em 2000. Além disso, anualmente, o LNCC alcança quase 3 mil pessoas em eventos de popularização da ciência.



O Supercomputador Santos Dumont



Interior do Supercomputador Santos Dumont

O supercomputador Santos Dumont (SDumont), adquirido junto a empresa francesa ATOS/BULL, está localizado na sede do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), em Petrópolis-RJ, atuando como nó central (Tier-0) do Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho - SINAPAD. O SDumont possui capacidade instalada de processamento na ordem de 5,1 Petaflop/s ($5,1 \times 10^{15}$ float-

point operations per second), apresentando uma configuração híbrida de nós computacionais, no que se refere à arquitetura de processamento paralelo disponível.

Possui um total de 34.688 núcleos de CPU, distribuídos em 1132 nós computacionais, dos quais são compostos, na sua maioria, exclusivamente por CPUs com arquitetura multi-core. Há, no entanto, quantidade adicional significativa de nós que, além das mesmas CPUs multi-core, contém tipos de dispositivos com a chamada arquitetura many-core: GPU e MIC. O SDumont é dotado de um nó diferenciado, o MESCA2, com número elevado de núcleos (240) e arquitetura de memória compartilhada de grande capacidade (6 Tb em um único espaço de endereçamento). Além disso, existe um nó especialmente projetado para aplicações de Inteligência Artificial (Deep Learning) que dispõe de 8 GPUs NVIDIA Tesla V100-16Gb com Nvlink, totalizando 40.960 CUDA-core e 5120 Tensor-core. Uma descrição detalhada da configuração dos nós do SDumont é apresentada a seguir.

504 nós de computação B710 (thin node), onde cada nó possui 2 CPU Intel Xeon E5-2695v2 Ivy Bridge (12c @2,4GHz) e 64Gb de memória RAM

198 Nós de computação B715 (thin node) com GPUs K40, onde cada nó possui 2 x CPU Intel Xeon E5-2695v2 Ivy Bridge (12c @2,4GHz) e 64Gb de memória RAM

54 nós de computação B715 (thin node) com XEON PHI, onde cada nó possui 2 x CPU Intel Xeon E5-2695v2 Ivy Bridge (12c @2,4GHz) e 64Gb de memória RAM

1 nó de computação MESCA 2 com memória compartilhada, 16 x CPU Intel Xeon Ivy Bridge (15c @2,4GHz) e 6TB de memória RAM

246 nós computacionais (CPU), cada um com 2x Intel Xeon Skylake 6152 (22c @ 2.1GHz) e 384Gb de memória RAM

36 nós computacionais (CPU), cada um com 2x Intel Xeon Skylake 6152 (22c @ 2.1GHz) e 768 Gb de memória RAM

94 nós computacionais (GPU), cada um com 2x Intel Xeon Skylake 6152 (22c @ 2.1GHz), 4x NVIDIA Volta V100 GPU e 384Gb de memória RAM

1 nó para Inteligência Artificial com 2x Intel Xeon Skylake Gold 6148 (20c @2,4GHz), 8x NVIDIA Tesla V100-16GB com NVLink e 384Gb de memória RAM

Os 1132 nós do SDumont são interligados por uma rede de interconexão Infiniband FDR/HDR proporcionando alto rendimento e baixa latência tanto para comunicação entre os processos quanto para o acesso ao sistema de arquivos.

Por fim, o SDumont dispõe de um sistema de arquivos paralelo Lustre, integrado a rede Infiniband, com capacidade bruta de armazenamento da ordem de 1,7 PBytes, bem como um sistema de arquivos secundário com capacidade bruta de 640 TBytes.

Fotos do LNCC e do Supercomputador Santos Dumont,

constam nos anexos dentro da pasta de arquivo baixada.

Mais informações:

www.lncc.br

arcos@lncc.br

Atualizado e publicado em: 14/05/2020



MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA,
INOVAÇÕES E COMUNICAÇÕES

