

## Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho - SP



Um órgão da Unicamp

A serviço do Brasil

Silvio A. Vitiello  
Coordenador

125ª Reunião

Coordenadoria integrada de Tecnologia da Informação e Comunicação  
26 de outubro de 2018

- ▶ Um dos principais centros multiusuários de processamento de alto desempenho (HPC) a serviço da comunidade científica brasileira
  - Sinapad** Sistema nacional de computação de alto desempenho idealizado pelo MCT no final dos anos 80
  - Cenapad-SP** Órgão da Unicamp criado em 1994 como parte do Sinapad
    - ▶ Custeio - Unicamp
    - ▶ Investimento - Finep e Fapesp

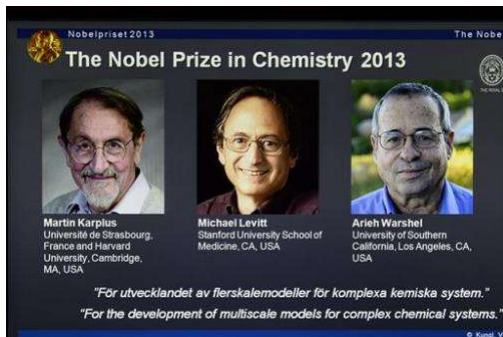
## Principais competências técnicas

---

- ▶ Administração e monitoramento de ambientes computacionais de alto desempenho
- ▶ Gerenciamento de infraestrutura
  - ▶ conectividade
  - ▶ administração de filas
  - ▶ armazenamento
  - ▶ virtualização
- ▶ Disponibilização de ferramentas para computação paralela
  - ▶ OpenMPI
  - ▶ MPI
- ▶ Computação em nuvem

## HPC é importante na pesquisa contemporânea

- ▶ O premio Nobel de química de 2013 foi dado pelo **desenvolvimento de modelos de escala múltiplas para sistemas químicos complexos** que requerem um imenso poder computacional



- ▶ Os vencedores desenvolveram modelos computacionais que podem aplicar cálculos quânticos e clássicos a diferentes partes de uma única molécula

## Um centro de HPC na Unicamp?

---

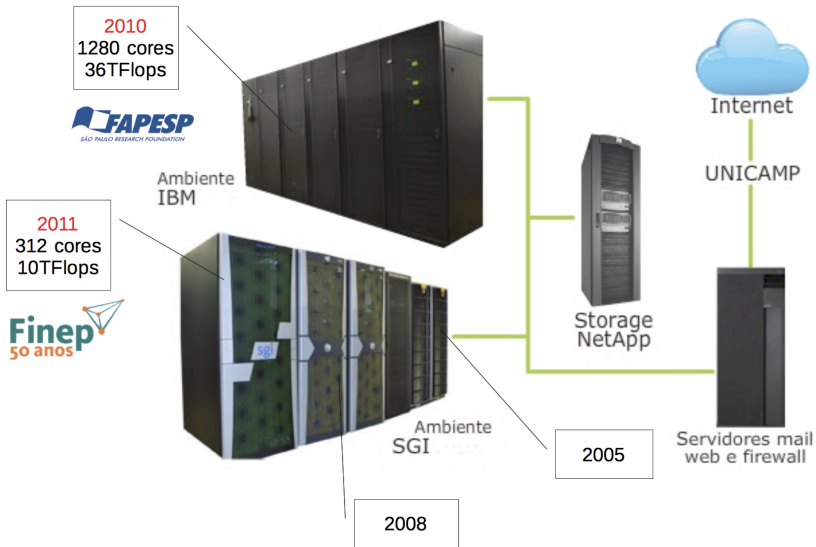
- ▶ Preservar uma equipe técnica altamente especializada na Unicamp
- ▶ Equipe que mantém excelência em novas tendências de HPC com mais de 20 anos de experiência
- ▶ Facilitar o programa local de inovação científica através a interação direta dos pesquisadores com a equipe técnica para incentivar o desenvolvimento de software e aumentar a eficiência na utilização dos recursos de HPC disponíveis
- ▶ Racionalizar a utilização dos recursos disponíveis e reduzir a fragmentação de investimentos em infraestrutura de HPC na Unicamp
- ▶ Identificar comunidades onde o uso de HPC é imprescindível

# Aspecto crítico na HPC



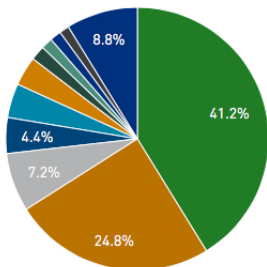
- ▶ O desenvolvimento de software tornou-se um dos aspectos mais críticos por ser o elemento essencial para a exploração das atuais e futuras gerações de supercomputadores
- ▶ O importante no ecossistema de HPC são as habilidades necessárias para combinar o entendimento de uma disciplina científica e o domínio da ciência computacional
- ▶ As necessidades científicas são motores para sistemas computacionalmente mais poderosos

# Nossas máquinas



## TOP500 :: BRICS + México :: Jun 2018 (Nov 2017)

Pais	Sistemas	Cores
Brasil	1 (0)	38.400
Rússia	4 (3)	200.880
Índia	5 (4)	310.344
China	206 (202)	25.107.680
Africa do Sul	1 (1)	32.856
México	- (1)	(18.928)



### NSF

- ▶ 6000 cientistas
- ▶ 16 centros de supercomputação

### Cenapad-SP

- ▶ 632 usuários



Cenapad-SP

Resultados

## Participação na Pesquisa

### ► Publicações por ano - Web of Scince



## Resultados de pesquisas em 2017

---


- ▶ 148 publicações no WebofScience de um total de 252 no total
- ▶ 14 teses de doutorado

## Algumas das áreas atendidas pelo Cenapad-SP



► Web of Science

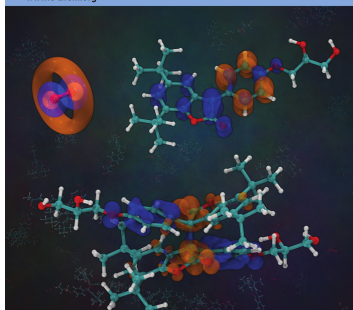
## Dynamic Covalent Bond from First Principles: Diarylbibenzofuranone Structural, Electronic, and Oxidation Studies

Gabriel R. Schleder <sup>[a]</sup>, Adalberto Fazio <sup>[b,c]</sup> and Jeverson T. Arantes <sup>[a]</sup>

Volume 38 | Issues 31–32 | 2017  
Available in this print edition:  
Issue 31 (December 8, 2017)  
Issue 32 (December 15, 2017)

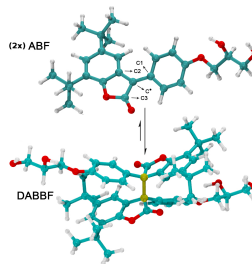
Journal of  
**COMPUTATIONAL  
CHEMISTRY** Organic • Inorganic • Physical  
Biological • Materials

www.c-chem.org



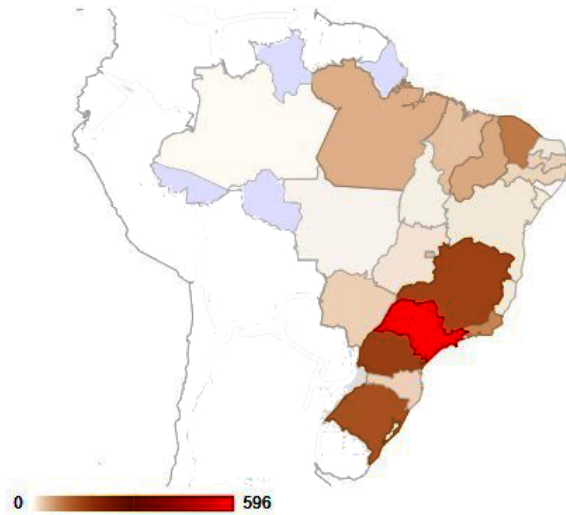
Editors:  
Charles L. Brooks III • Masahiro Ehara • Gábor Ertl • Peter B. Schmitzer

WILEY

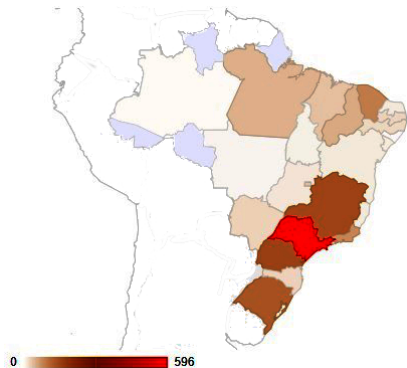


- Estrutura molecular geométricamente otimizada

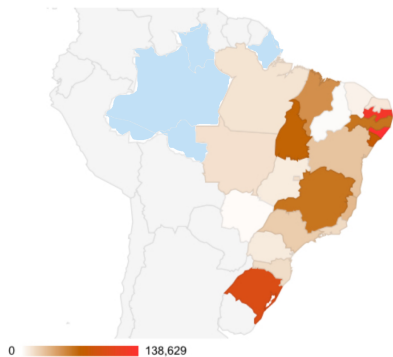
# Publicações com autores em instituições dos estados do Brasil 2010-2017



# Desafio: procurar equilibrar utilização produção com utilização de recursos

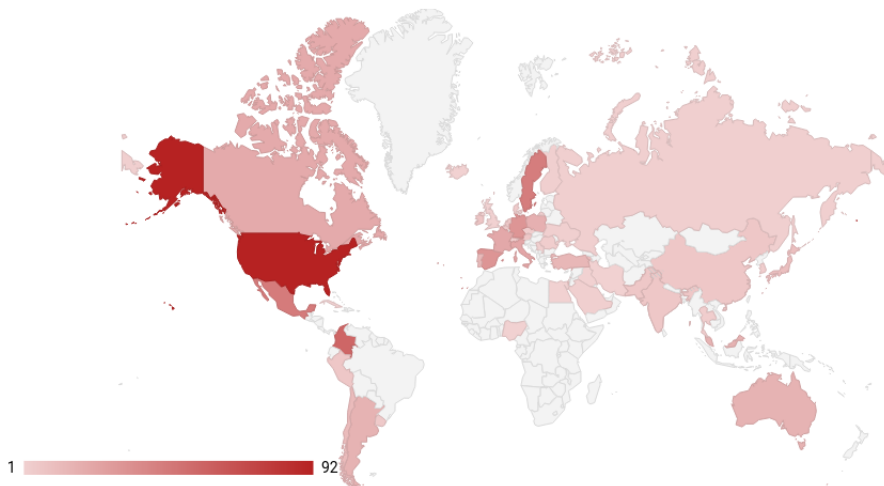


► Artigos publicados



► Horas utilizadas / Publicações

## Publicações com colaboradores no exterior



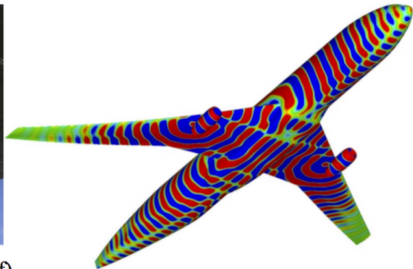


- ▶ 2018
  - ▶ Participação no curso de pós-graduação Instituto de Física *Gleb Wataghin*  
**FI 200 Física computacional e programação paralela**
- ▶ Contribuições do Cenapad-SP em 2017
  - ▶ 14 Teses de doutorado
  - ▶ 18 Dissertações de mestrado

- ▶ **Treinamentos** realizados através de workshops que proporcionam o conhecimento e habilidades para o uso eficiente do HPC e contribuem para a formação da comunidade científica
  - ▶ 15 workshops com 144 participantes
- ▶ Recebemos ao menos uma vez por ano alunos de nível médio para visitas guiadas ao Cenapad-SP
  - ▶ 2018-2016 Escola Técnica Estadual Bento Quirino// 30 participantes em cada uma delas
  - ▶ 2015 Faculdade de Tecnologia do Estado de São Paulo Barueri
  - ▶ 2014 Escola Técnica Estadual João Belarmino

# Simulação aerodinâmica e aeroacústica

William R. Wolf  
 Universidade Estadual de Campinas  
 Faculdade de Engenharia Mecânica



(A. Cavalieri, P. Jordan, W. Wolf)

- onde instalar o motor aeronáutico de forma a se reduzir o ruído da interação jato + asa?
- desenvolvimento de métodos de solução rápida em computadores paralelos



SUSTENTABILIDADE | IMPRENSA | FORNECEDORES | INVESTIDORES

YouTube LinkedIn Facebook

BUSCAR

[Serviços para você](#) [Sua casa](#) [Seu negócio](#) [Poder público](#) [Prestadores de serviço](#) [Fale com a gente](#) [Elektro](#)



Fazer Login

Brasil

Fale conosco

Chat agora

BUSCAR



[Soluções por Indústria](#) [Produtos](#) [Aprenda SAS](#) [Suporte](#) [Casos de Sucesso](#) [Parceiros](#) [Sobre o SAS](#)

Softwares & Soluções de Analytics

Solicite uma Cotação



## Metas para 2018

---

- ▶ Buscar um equilíbrio entre a utilização feita pelos nossos usuários e sua produção científica
  - ▶ Aprimoramento dos processos de revisão por pares ou agências de fomento na atribuição de tempo de máquina
- ▶ Atualização do parque computacional e da infraestrutura de funcionamento (projeto Finep)
- ▶ Renovação do site: identidade visual e atualização de conteúdo
- ▶ Procurar atrair e integrar ativamente estudantes da Unicamp nos procedimentos de HPC
- ▶ Finalizar a implementação do Cenapad-SP sem papel

## Comentários finais

---

- ▶ O Cenapad-SP possui um sistema transparente de custos da infraestrutura computacional o que permite uma avaliação constante dos investimentos realizados e da racionalidade dos recursos empregados
- ▶ O downtime das máquinas do Cenapad-SP é desprezível comparado ao tempo disponível para uso

Obrigado pela atenção!

# Slides de reforço



# HPC e Nuvem

## sistemas competidores ou complementares?

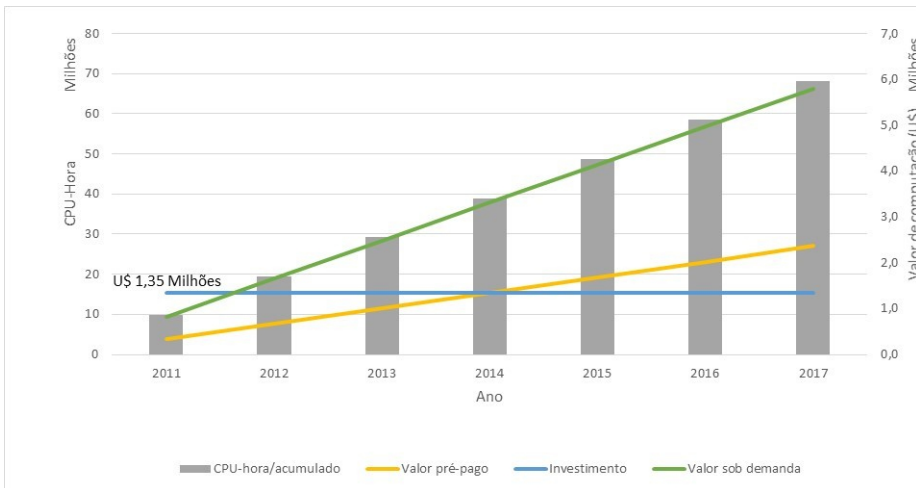
---



MARCO A. S. NETTO, IBM Research, *et. al.*, ACM Computing Surveys, Vol. 51, No. 1, Article 8.  
Publication date: January 2018

- ▶ Dificuldades
  - ▶ A otimização de aplicações HPC é limitada pela infraestrutura abstrata subjacente da nuvem
  - ▶ A maioria das nuvens não são velozes o suficiente para aplicações com acoplamento forte entre os cores
- ▶ Benefícios, *ibidem*,
  - ▶ Aplicações com tarefas independentes podem se beneficiar de um número variável de recursos e são tolerantes a sua heterogeneidade
- ▶ **The European Cloud Initiative**
  - ▶ HPC é essencial para a infraestrutura de dados europeia
  - ▶ Conclama todos os estados membros apoiarem o desenvolvimento do ecossistema de HPC

## Custo comparativo máquina IBM



► Referências Projeto FAPESP e Amazon