

EQUIPE CENAPAD LNCC

- **Pesquisadores:** Carla Osthoff, Roberto Souto, Douglas Cardoso(CEFET/Petrópolis), Diego Carvalho(CEFET/RJ), Sanderson Gonzaga (UFLavras)
- **Tecnologistas:** André Carneiro e Bruno Fagundes
- **Analistas de TI:** Maria Eugenia Welter, Frederico Cabral, Stiw Herrera
- **Bolsista Petrobras:** Micaella Coelho e Thiago Teixeira e Frederico Cabral
- **Bolsistas PIBIC:** Lucas Cruz, Guilherme Freire, Alexandre Clem
- **Alunos de Mestrado:** Weber Ribeiro (colaboração com Márcio Borges/LNCC), André Carneiro (colaboração com prof. Philippe Navaux/UFRG), Micaella Coelho (colaboração com Kary Ocana/ LNCC), Thiago Teixeira (Colaboração com Márcio Borges), Rafael Terra (Colaboração com Kary Ocaña)
- **Doutorando:** Frederico Cabral (colaboração com Renato Portugal)/LNCC e Maria Eugênia (Colaboração com Haroldo Velho/INPE)

PROJETOS CENAPAD 2022

I- Projeto 3D-VAR (Colaboração com o INPE):

Membros: Campos Velho. H.F. ; SABATINI, S.B.M ; FURTADO, H.C.M. ; **OSTHOFF, CARLA** ; WELTER, M. E. S. ; CARVALHO, DIEGO ; CARDOSO, D. Souto, Roberto P.

O planeta terra está rodeado de sistemas altamente dinâmicos nos quais os gases e vapores que o constituem interagem dinamicamente, térmica e quimicamente sob influência da superfície terrestre, oceanos e radiação solar. A atmosfera terrestre é formada por camadas heterogêneas que estão subdivididas em quatro camadas distintas conforme a inversão de temperatura: troposfera, estratosfera, mesosfera e termosfera.

Modelos computacionais que representam a atmosfera estão separados em dois grupos: modelos globais e modelos regionais. Ambos simulam a dinâmica da atmosfera por meio de equações em suas respectivas escalas (global e regional). Os modelos regionais têm resolução mais refinada permitindo uma melhor previsão da área de interesse. Devido ao avanço tecnológico e o aumento de dados coletados das observações podemos cada dia avançar mais na qualidade dos resultados. Por isso, requer cada vez mais o uso de computadores para o processamento desses dados. Uma das ferramentas utilizadas é o paralelismo computacional. O paralelismo é uma ótima alternativa na modelagem para aumentar o desempenho computacional e diminuir o tempo de processamento. Com o paralelismo podem ser executados vários cálculos ao mesmo tempo e as grandes tarefas divididas em pequenas e estas serão solucionadas em paralelo para obter

resultados mais rápidos. Um dos grandes benefícios além de obter resultados mais rápidos é a diminuição do custo de energia gasto pela máquina, claro que sem mudar o resultado final.

A questão de obtenção de melhores resultados vem acompanhada de grandes desafios, um deles é na área de pesquisa chamada de assimilação de dados. É uma técnica utilizada para a correção de imprecisões nos dados dos modelos. Ela é usada para o aprimoramento das condições iniciais que são de fundamental importância para gerar previsões mais precisas. A assimilação de dados consiste na combinação de dois dados (dados gerados pelo modelo + dados de observação). O resultado dessa combinação será a próxima condição inicial para o modelo fazer a previsão. Ou seja, a assimilação é uma forma de aprimorar as condições iniciais. O aprimoramento das condições iniciais é de fundamental importância pois gera previsões mais precisas. Quando a previsão do tempo é feita de forma operacional a assimilação de dados acaba sendo um problema chave. Sendo esse um processo que atualmente demanda um grande esforço computacional do sistema de previsão. Essa demanda é devido aos algoritmos de assimilação utilizarem operações matriciais computacionalmente pesadas. Uma forma de reduzir o custo é através do uso de Redes Neurais Artificiais (RNA). A RNA irá emular o algoritmo de assimilação e assim reduzirá o custo computacional de forma significativa. Por meio de pesquisas anteriores conseguiu-se uma redução no tempo de computação utilizando a Rede Neural Artificial para treinar os algoritmos de assimilação. O ganho computacional foi de até 95 vezes mais rápido nos modelos globais e 70 vezes mais rápido em modelo regional, com esse resultado verifica-se uma grande alternativa para substituir os algoritmos de assimilação por Redes Neurais Artificiais. Por fim, mesmo com essa redução no custo computacional, nos casos em que o domínio espacial é discretizado por uma grade contendo vários pontos a rede neural ao emular os algoritmos de assimilação de dados passa a ser como um dos grandes gargalos de desempenho. Outra estratégia para a pesquisa é empregar o paralelismo nas redes neurais, pois ela é realizada de forma independente em cada ponto da grade e assim subdividir o domínio para executar cada domínio em diferentes nós ou núcleos computacionais.

O principal objetivo do Grupo de Pesquisa em assimilação de dados por redes neurais é aplicar redes supervisionadas (RNS) para emular métodos de assimilação serão desenvolvidos os experimentos:

- (a) Emular o método 3D-Var associado ao modelo WRF;
- (b) Emular a análise do WRF para o modelo BRAMS;
- (c) Empregar o paralelismo nas redes neurais.

Os modelos WRF e BRAMS serão aplicados para 2 domínios nas regiões norte e sul do Brasil, usando as mesmas resoluções espaciais (horizontal e vertical).

O método 3D-Var será usado para fazer assimilação de dados no modelo WRF. Em estudos anteriores foi mostrado que a Rede Neural Artificial consegue uma boa representatividade dos métodos e com isso pode ser utilizada para melhorar o

tempo de processamento dos modelos, sendo que a assimilação de dados consome boa parte do tempo de processamento. Essa técnica será utilizada para emular o 3D-Var.

Publicações :

- *Campos Velho, H. F., Furtado, H. C. M., Sambatti, S. B. M., Osthoff Ferreira de Barros, C. B., Welter, M. E. S., Souto, R. P., Carvalho, D. ., & Cardoso, D. O. (2022). Data Assimilation by Neural Network for Ocean Circulation: Parallel Implementation. Supercomputing Frontiers and Innovations, 9(1), 74–86. <https://doi.org/10.14529/jsfi220105>*
- *Campos Velho. H.F. ; SABATINI, S.B.M ; FURTADO, H.C.M. ; OSTHOFF, CARLA ; WELTER, M. E. S. ; CARVALHO, DIEGO ; CARDOSO, D. ; Souto, Roberto P. . Parallel execution of an artificial neural network for data assimilation of the shallow-water 2D problem.. In: XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE-2021) | 3rd Pan American Congress on Computational Mechanics, 2021, Rio de Janeiro. XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE-2021) | 3rd Pan American Congress on Computational Mechanics, 2021.*

II- Projeto "Método Numérico Escalável para o escoamento Bifásico de Fluidos em Meios Porosos em ambientes Computacionais de Alto Desempenho". (Colaboração LNCC/UFRGS/CINVESTAV (Costa Rica)

Membros: Stiw Herrera , Thiago Teixeira ,Weber Ribeiro, André Carneiro, Frederico L. Cabral , Sanderson L. Gonzaga de Oliveira , Matheus Serpa , Marcio Borges , Esteban Meneses , Carla Osthoff , Philippe Navaux

Dentro de diversas áreas da engenharia e ciências aplicadas, existe um grande interesse no desenvolvimento de modelos matemáticos e métodos computacionais

para a simulação de escoamentos em meios porosos. Na engenharia de Petróleo, a otimização dos processos de recuperação de hidrocarbonetos está intimamente relacionada com a simulação precisa destes processos. Para isto, diversos fatores devem ser adequados e considerados nos modelos físico-matemático e numéricos, como por exemplo a troca de massa e momento linear das fases que escoam, suas relações de capilaridade e mobilidade, a estabilidade dos poços de produção e injeção, dentre inúmeros outros [Correa 2013]. O modelo computacional deste estudo apresenta uma metodologia numérica, proposta em [Correa], para a simulação do escoamento bifásico (água e óleo) em um reservatório rígido altamente heterogêneo. Este problema é modelado por um sistema de equações diferenciais parciais, basicamente composto por um subsistema elíptico para a determinação do campo de velocidades e uma equação hiperbólica não linear para o transporte das fases que escoam (equação da saturação). Do ponto de vista numérico, o modelo propõe a aplicação de um método de elementos finitos localmente conservativo para a velocidade da mistura e um método de volumes finitos não-oscilatório de alta ordem, baseado em esquemas centrais, para a equação hiperbólica não-linear que governa a saturação das fases.

Do ponto de vista computacional este projeto visa desenvolver um ambiente computacional escalável para o estudo de métodos numéricos desenvolvidos pelo grupo de óleo e gás do LNCC.

Publicações:

- ***Stiw Herrera, Thiago Teixeira, Weber Ribeiro, André Carneiro, Frederico L. Cabral, Matheus Serpa, Márcio Borges, Carla Osthoff, Sanderson L. Gonzaga de Oliveira, Philippe Navaux. Optimizations in a numerical method code for the biphasic fluid flow in porous media using the SDumont supercomputer. In: XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE-2021), 2021, Rio de Janeiro (online). Proceedings of XLII Ibero-Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE-2021), 2021.***
- ***Correa, M. & Borges, M., 2013. A semi-discrete central scheme for scalar hyperbolic conservation laws with heterogeneous storage coefficient and its application to porous media flow. International Journal for Numerical Methods in Fluids, vol. 73, n. 3, pp. 205–224.***

- *Taibe, S. H. H., Teixeira, T, Ribeiro, W., Carneiro, A., Cabral, F. L., Gonzaga de Oliveira S.L., Serpa, M. S., Borges, M. R., Esteban Meneses, Osthoff, C., Navaux, P. SCALABLE NUMERICAL METHOD FOR BIPHASIC FLOWS IN HETEROGENEOUS POROUS MEDIA IN HIGH-PERFORMANCE COMPUTATIONAL ENVIRONMENTS. In: The Event for High Performance Computing, Machine Learning and Data analysis (ISC), 2021. The Event for High Performance Computing, Machine Learning and Data analysis (ISC), 2021*
- *Weber Ribeiro, Thiago Teixeira , Frederico L. Cabral, Carla Osthoff, Márcio Borges, Otimização para Ambientes Intel de um Método Numérico para o Escoamento Bifásico de Fluidos em Meios Porosos Através da Eliminação de Barreiras OpenMP. Workshop de Iniciação Científica do Simpósio Brasileiro de Computação de Alto Desempenho 2019(WSCAD-WIC).*

III- Projeto : "Pesquisa e desenvolvimento de otimização e modernização de código para métodos numéricos de diferenças finitas para solução de equações diferenciais parciais em arquiteturas paralelas híbridas."

Colaboração: LNCC/UFF/CEFET

Membros: Carla Osthoff Ferreira de Barros - Coordenador / Frederico Luís Cabral - Integrante / Diego Brandão - Integrante / Mauricio Kischinhevsky - Integrante / Sanderson L. Gonzaga de Oliveira - Integrante.

Os modelos computacionais destinados à solução numérica de equações diferenciais parciais são amplamente usados atualmente e se beneficiam da cada vez mais crescente gama de tecnologias que permitem aumento de desempenho, fazendo com que os problemas sejam resolvidos mais rapidamente. Neste cenário

podemos destacar a vetorização e a paralelização como metodologias de otimização e modernização. Enquanto a primeira objetiva que uma unidade de processamento seja usada o mais eficientemente possível, a segunda objetiva o uso de mais unidades de processamento simultaneamente. O método HOPMOC é um método numérico de diferenças finitas para solução de equações diferenciais parciais e foi proposto como um método para resolução de problemas de convecção-difusão com dominância convectiva para ser executado em ambientes compostos por máquinas paralelas. Ele permite uma decomposição espacial do domínio do problema, onde cada subproblema pode ser resolvido independentemente. Além disso, ele minimiza a troca de informações entre regiões vizinhas, reduzindo assim a troca de mensagens entre os nós do ambiente distribuído. Outra característica é que seu custo por instante de tempo é conhecido a priori, além de usar uma estratégia baseada na busca por informação ao longo da linha característica para cada instante de tempo. Técnicas de decomposição de operadores, como as empregadas pelo HOPMOC, foram estudadas durante as últimas décadas com o propósito de reduzir o custo computacional dos métodos para solucionar problemas multidimensionais evolutivos modelados por equações diferenciais parciais. Hoje com o avanço das tecnologias de paralelismo em ambientes de memória compartilhada e distribuída, o foco da pesquisa tem sido no desenvolvimento de estratégias que explorem ao máximo as capacidades computacionais desses ambientes.

Publicações:

- **Osthoff, C.; Cabral, Frederico ; OLIVEIRA, S. L. G. . Reducing Cache Miss Rate Using Thread Oversubscription to Accelerate an MPI-OpenMP-Based 2-D Hopmoc Method. *International Conference on Computational Science and Its Applications*. 1ed.: Springer, 2022, v. 1, p. 337-353. doi: [/10.1007/978-3-031-10522-7_24](https://doi.org/10.1007/978-3-031-10522-7_24)**
- **Gonzaga de Oliveira, S.L.; Santana M. ; Brandão, Diego N. ; Osthoff, Carla. Uma implementação da busca em largura com estrutura bag e OpenMP. In: *WSCAD 2021 - XXII Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, 2021, Belo Hiorizonte. Proceedings of the WSCAD 2021 - XXII Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, 2021***

- **ROBAINA, D. T. ; Gonzaga de Oliveira, S.L. ; Kischnevsky, M. ; OSTHOFF, C. ; SENA, A. C.** *A convergence analysis of a multistep method applied to an advection-diffusion equation in 1-D.* In: *The 20th International Conference on Computational Science and its Applications - ICCSA, 2020, Cagliari.* *Lecture Notes in Computer Science.* Cham: Springer, 2020. v. 12249. [doi:/10.1007/978-3-030-58799-4_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4_1)
- **CABRAL, F. L. ; Gonzaga De Oliveira, S. L. ; OSTHOFF, C. ; COSTA, G. P. ; BRANDAO, D. N. ; Kischnevsky, M.** *An evaluation of MPI and OpenMP paradigms in finite-difference explicit methods for PDEs on shared-memory multi - and manycore systems.* *CONCURRENCY AND COMPUTATION-PRACTICE AND EXPERIENCE*, v. 32, p. e5642, 2020. doi.org/10.1002/cpe.5642
- **Diogo T. Robaina, Sanderson L. Gonzaga de Oliveira, Mauricio Kischinhevsky, Carla Osthoff.** *NUMERICAL SIMULATIONS OF THE 1-D MODIFIED BURGERS EQUATION.* *Proceedings of the 2019 Winter Simulation Conference.* [doi: 10.1109/WSC40007.2019.9004661](https://doi.org/10.1109/WSC40007.2019.9004661)
- **S. L. Gonzaga de Oliveira, C. Carvalho, C. Osthoff.** *The effect of symmetric permutations on the convergence of a restarted GMRES solver with ILU-type preconditioners.* *Proceedings of the 2019 Winter Simulation Conference.* [doi: 10.1109/WSC40007.2019.9004742](https://doi.org/10.1109/WSC40007.2019.9004742)
- **CABRAL, FREDERICO L. ; OSTHOFF, CARLA ; Souto, Roberto P. ; Costa, Gabriel P. ; Gonzaga de Oliveira, Sanderson L. ; Brandão, Diego ; KISCHINHEVSKY, MAURICIO .** *Fine-Tuning an OpenMP-Based TVD Hopmoc Method Using Intel® Parallel Studio XE Tools on Intel® Xeon® Architectures.* *Communications in Computer and Information Science.* 1ed.: Springer International Publishing, 2019, v. , p. 194-209. [doi: 10.1007/978-3-030-16205-4_15](https://doi.org/10.1007/978-3-030-16205-4_15)
- **Cabral, Frederico ; OSTHOFF, CARLA ; Souto, Roberto Pinto ; Costa, Gabriel P. ; DE OLIVEIRA, SANDERSON L. GONZAGA ; Brandão, Diego N. ; KISCHINHEVSKY, MAURICIO .** *An Improved OpenMP Implementation of the*

TVD Hopmoc Method Based on a Cluster of Points. Water Resources Development and Management. 1ed.: Springer Singapore, 2019, v. , p. 132-145. [doi:10.1007/978-3-030-15996-2_10](https://doi.org/10.1007/978-3-030-15996-2_10)

- *Gonzaga de Oliveira, S. L. ; Abreu, A. A. A. M. ; Osthoff, C. ; Henderson Guedes de Oliveira, L. N. . A Variant of the George-Liu Algorithm. Lecture Notes in Computer Science. 1ed.: Springer International Publishing, 2019, v. , p. 3-12. doi: 10.1007/978-3-030-24289-3_1*
- *Gonzaga de Oliveira, S. L. ; Osthoff, C. ; Henderson Guedes de Oliveira, L. N. . An Experimental Analysis of Heuristics for Profile Reduction. In: International Conference on Computational Science and Its Applications - ICCSA, 2019. Lecture Notes in Computer Science. 1ed.: Springer International Publishing, 2019, v. , p. 25-36. doi: 10.1007/978-3-030-24289-3_3*
- *Robaina, Diogo; SANDERSON L. GONZAGA ; KISCHINHEVSKY, MAURICIO; OSTHOFF, CARLA Sena, A. C.; NUMERICAL SIMULATIONS OF THE 1-D MODIFIED BURGERS EQUATION, Proceedings of the 2019 Winter Simulation Conference*
- *Cabral, F.L.; Osthoff, C.; Souto, R.P.; Costa, G.P.; Gonzaga de Oliveira, S.L.; Brandão, D.; Kischinhevsky, M. Fine-tuning an OpenMP-based TVD-Hopmoc method using Intel Parallel Studio XE tools on Intel Xeon Architectures. Fifth Latin American Conference, CARLA 2018 - Communications in Computer and Information Science. Springer. doi: 10.1007/978-3-030-16205-4_15*
- *Cabral, F.L.; Osthoff, C.; Costa, G.P.; Gonzaga de Oliveira, S.L.; Brandão, D.; Kischinhevsky, M. An improved OpenMP implementation of the TVD–Hopmoc method based on a cluster of points. 3th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science, VECPAR 2018 - Communications in Computer and Information Science. Springer. doi: 10.1007/978-3-030-15996-2_10*
- *Cabral, F.L.; Osthoff, C.; Costa, G.P.; Gonzaga de Oliveira, S.L.; Brandão, D.; Kischinhevsky, M. An OpenMP Implementation of the TVD Hopmoc Method Based on a*

Synchronization Mechanism Using Locks Between Adjacent Threads on Xeon Phi (TM) Accelerators. Lecture Notes in Computer Science. Springer International Publishing, 2018, v. 3, p. 701-707. doi: 10.1007/978-3-319-93713-7_67

- *Brandão, D.; Oliveira, S.L.G.; Kischinhevsky, M.; Osthoff, C.; Cabral, F.L. A total variation diminishing Hopmoc scheme for numerical time integration of evolutionary differential equations. The 18th International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2018), 2018, Melbourne. doi: 10.1007/978-3-319-95162-1_4*

IV- Projeto: Desenvolvendo Gateways Científicos Eficientes para Bioinformática em Ambientes de Supercomputadores através de Inteligência artificial

Lucas Cruz, Micaella Coelho, Rafael Terra, Diego Carvalho, Luiz Gadelha, Carla Osthoff, Kary Ocaña, Guilherme Freire, Douglas Cardoso

Este projeto visa desenvolver gateways científicos (verdes) eficientes e inteligentes para bioinformática para ambientes de computação de alto desempenho (HPC) e implementando tecnologias de workflows científicas, de mineração de dados e de aprendizado de máquina. A análise eficiente e interpretação de Big Data abre novos desafios para explorar biologia molecular, genética, biomedicina, e cuidados de saúde para melhorar o diagnóstico e a terapêutica personalizados; então, torna-se necessário à disponibilidade de novos caminhos para lidar com essa enorme quantidade de informações. Novos paradigmas na Bioinformática e na Biologia Computacional impulsionam o armazenamento, o gerenciamento e o acesso de dados a utilização de HPC e dos avanços do Big Data neste domínio representam um vasto campo de oportunidades para os pesquisadores de bioinformática assim como um grande desafio. O portal da ciência Bioinfo-Portal (<https://bioinfo.Incc.br/>) é uma infraestrutura multiusuária brasileira desenvolvida para aplicações de bioinformática que se beneficia da infraestrutura HPC, que apresenta diversos desafios para permitir uma execução eficiente de aplicativos assim como melhorar o uso de recursos computacionais. Realizamos experimentos de bioinformática em larga escala que são considerados computacionalmente intensivos e demorados. Estamos atualmente acoplado artificial inteligência para gerar modelos para analisar metadados computacionais e de bioinformática para entender como o

aprendizado automático pode prever o uso eficiente dos recursos computacionais. As execuções computacionais são realizadas no Santos Dumont (SDumont, <https://sdumont.lncc.br/>), o maior supercomputador da América Latina dedicado à pesquisa científica com 5,1 Petaflops e 36.472 núcleos computacionais distribuídos em 1.134 nós computacionais.

Publicações:

- Silva, L. C. ; Coelho, M. ; Terra, R. S. ; Carvalho, D. ; GADELHA, LUIZ M.R. ; OSTHOFF, CARLA ; OCAÑA, K.A.C.S. . **Workflows Científicos de RNA-Seq em Ambientes Distribuídos de Alto Desempenho: Otimização de Desempenho e Análises de Dados de Expressão Diferencial de Genes**. In: *Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2021)*, 2021, Florianópolis, Santa Catarina. *Anais do XV Brazilian e-Science Workshop*, 2021.doi.org/10.5753/bresci.2021.15789
- Terra, R. S. ; OSTHOFF, CARLA ; Carvalho, D. ; OCAÑA, K.A.C.S. ; Coelho, M. ; Gadelha, L. ; Garcia-Zapata, M. T. A. ; Silva, L. C. . **Gerência e Análises de Workflows aplicados a Redes Filogenéticas de genomas de Dengue no Brasil**. In: *Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2021)*, 2021, Florianópolis, Santa Catarina. *Anais do XV Brazilian e-Science Workshop*, 2021.doi.org/10.5753/bresci.2021.15788
- Terra, R. S. ; Ocaña, K.A.C.S.; Osthoff, CARLA; Silva, L. C.; Coelho, M.; Navaux, P.; Zanon-Boito, F.; Carvalho, D.; Cardoso, D. ; Freire, G.; Carneiro, A.; Fagundes, B.; Galheigo, Marcelo; Cleim, A. ; Cabral, M. ; Gadelha, Luiz M.R. . **Experiences in Executing Data-Intensive Bioinformatics Experiments in the Santos Dumont Supercomputer**. In: *BioCARLA - The Latin America High Performance Computing Conference*, 2021, México. *BioCARLA - The Latin America High Performance Computing Conference*, 2021.
- Terra, R. S. ; Ocaña, K.A.C.S. ; Carvalho, D. ; Osthoff, C. ; Garcia-Zapata, M. T. A. . **A phylogenetic network-based experiment for the identification of reticulation events in Brazilian Dengue**. In: *II Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution (SBE)*, 2021, Online. *II Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution (SBE)*, 2021.
- Terra, R. S. ; Osthoff, C. ; Carvalho, D. ; Ocaña, K.A.C.S. . **Modeling a workflow for the construction of phylogenetic**

networks in the high performance computing environment. In: *II Virtual Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution, 2021. II Virtual Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution.*

- Terra, R. S. ; Osthoff, CARLA ; Carvalho, D. ; Ocaña, K.A.C.S. ; Coelho, M. ; Gadelha, L. ; Garcia-Zapata, M. T. A. ; Silva, L. C. . **Gerência e Análises de Workflows aplicados a Redes Filogenéticas de genomas de Dengue no Brasil.** In: *Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2021), 2021, Florianópolis, Santa Catarina. Anais do XV Brazilian e-Science Workshop, 2021.* doi.org/10.5753/bresci.2021.15788
doi.org/10.5753/bresci.2021.15788
- Silva, L. C. ; Coelho, M. ; Terra, R. S. ; Carvalho, D. ; Gadelha, Luiz M.R. ; Osthoff, CARLA ; Ocaña, K.A.C.S. . **Workflows Científicos de RNA-Seq em Ambientes Distribuídos de Alto Desempenho: Otimização de Desempenho e Análises de Dados de Expressão Diferencial de Genes.** In: *Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2021), 2021, Florianópolis, Santa Catarina. Anais do XV Brazilian e-Science Workshop, 2021.* doi.org/10.5753/bresci.2021.15789
doi.org/10.5753/bresci.2021.15789
- OCAÑA, K.A.C.S.; Coelho, M. ; Terra, R. S. ; Freire, G. ; Santos, M. ; Silva, L. C. ; GALHEIGO, MARCELO ; Carneiro, A. ; Fagundes, B. ; Carvalho, D. ; Cardoso, D. ; Meneses, E. ; Gadelha, L. ; Osthoff, C. .**Developing Efficient Scientific Gateways for Bioinformatics in Supercomputer Environments supported by Artificial Intelligence.** In: *The Event for High Performance Computing, Machine Learning and Data analysis (ISC), 2021. The Event for High Performance Computing, Machine Learning and Data analysis (ISC), 2021.*
- Ocaña, K., Terra, R., Cruz, L., Freire, G., Cleim, A., Cabral, A., Coelho, M., Galheigo, M., Carneiro, , Fagundes, B., Carvalho, D., Cardoso, D., Gadelha, L., Zanon-Boito, F., and Osthoff, C..**Experiences in Executing Data-Intensive Bioinformatics Experiments in the Santos Dumont Supercomputer.**In: CARLA 2021. Latin American High Performance Computing Conference. Guadalajara, Mexico. Proceedings of the CARLA 2021- Latin American High Performance Computing Conference, 2021.

- Lucas Cruz, Micaella Coelho, Rafael Terra, Diego Carvalho, Luiz Gadelha, Carla Osthoff, Kary Ocaña. **Análise do Comportamento das Operações de Entrada e Saída de um Workflow Científico de RNA-Seq de Alto Desempenho.** In: ERAD-RJ 2021 - VII Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro, Petrópolis. Proceedings of the ERAD-RJ 2021 - VII Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro 2021.
- Terra, R. S. ; Ocaña, K.A.C.S.; Osthoff, CARLA; Silva, L. C.; Coelho, M.; Navaux, P.; Zanon-Boito, F.; Carvalho, D.; Cardoso, D. ; Freire, G.; Carneiro, A.; Fagundes, B.; Galheigo, Marcelo; Cleim, A. ; Cabral, M. ; Gadelha, Luiz M.R. . **Experiences in Executing Data-Intensive Bioinformatics Experiments in the Santos Dumont Supercomputer.** In: BioCARLA - The Latin America High Performance Computing Conference, 2021, México. BioCARLA - The Latin America High Performance Computing Conference, 2021.
- Terra, R. S. ; Ocaña, K.A.C.S. ; Carvalho, D. ; Osthoff, C. ; Garcia-Zapata, M. T. A. . **A phylogenetic network-based experiment for the identification of reticulation events in Brazilian Dengue.** In: II Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution (SBE), 2021, Online. II Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution (SBE), 2021.
- Terra, R. S. ; Osthoff, C. ; Carvalho, D. ; Ocaña, K.A.C.S. . **Modeling a workflow for the construction of phylogenetic networks in the high performance computing environment.** In: II Virtual Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution, 2021. II Virtual Meeting of Systematics, Biogeography, and Evolution.
- Lucas Cruz, Micaella Coelho, Rafael Terra, Diego Carvalho, Luiz Gadelha, Carla Osthoff, Kary Ocaña. **Análise do Comportamento das Operações de Entrada e Saída de um Workflow Científico de RNA-Seq de Alto Desempenho.** In: ERAD-RJ 2021 - VII Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro, Petrópolis. Proceedings of the ERAD-RJ 2021 - VII Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro 2021.
- OCAÑA, K.A.C.S.; Coelho, M. ; Freire, G. ; Osthoff, C. **High-Performance Computing of BEAST/BEAGLE in Bayesian Phylogenetics using SDumont Hybrid Resources.** In: Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2020), 2020,

Cuiabá, Mato Grosso. Anais do XIV Brazilian e-Science Workshop, 2020. [doi:/10.5753/bresci.2020.11190](https://doi.org/10.5753/bresci.2020.11190)

- Silva, L. C. ; Coelho, M. ; GADELHA, LUIZ M.R. ; OCAÑA, K.A.C.S. ; OSTHOFF, CARLA. **Avaliação de Desempenho de um Workflow Científico para Experimentos de RNA-Seq no Supercomputador Santos Dumont.** In: Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho (WSCAD 2020 - WIC), 2020. Anais do Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho, 2020.
- Kary Ocaña, Carla Osthoff, Micaella Coelho, Marcelo Galheigo, Isabela Canuto, Douglas de Oliveira, Daniel de Oliveira. **Performance Evaluation of Parallel Inference of Large Phylogenetic Trees in Santos Dumont Supercomputer: A Practical Approach.** Latin American High Performance Computing Conference CARLA 2019: High Performance Computing pp 448-463. [doi:10.1007/978-3-030-41005-6_31](https://doi.org/10.1007/978-3-030-41005-6_31).
- Kary A.C.S.Ocaña, Marcelo Galheigo, Carla Osthoff, Luiz M.R.Gadelha Jr, Fábio Porto, Antônio Tadeu A.Gomes, Daniel De Oliveira, Ana Tereza Vasconcelos. **A SCIENTIFIC GATEWAY FOR INTEGRATING BIOINFORMATICS APPLICATIONS ON THE BRAZILIAN NATIONAL HIGH-PERFORMANCE COMPUTING NETWORK.** Future Generation Computer Systems Volume 107, June 2020, Pages 192-214. [doi:10.1016/j.future.2020.01.030](https://doi.org/10.1016/j.future.2020.01.030).
- OCAÑA, K.A.C.S.; Galheigo, M. ; Osthoff, C. ; Gadelha, L. ; Gomes, A. T. A. ; Oliveira, D. C. M. ; Porto, F. A. M. ; Vasconcelos, A. T. R. . **Towards a Science Gateway for Bioinformatics: Experiences in the Brazilian System of High Performance Computing.** In: Workshop on Clusters, Clouds and Grids for Life Sciences (In conjunction with CCGrid 2019 - 19th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing), 2019, Cyprus. Proceedings of the Workshop on Clusters, Clouds and Grids for Life Sciences (In conjunction with CCGrid 2019 - 19th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing), 2019. [doi: 10.1109/CCGRID.2019.00082](https://doi.org/10.1109/CCGRID.2019.00082)
- Coelho, M.; Osthoff, C.; Ocaña, K.A.C.S. **Avaliação do RAxML no Supercomputador Santos Dumont.** 11th Brazilian Symposium

on Bioinformatics - Niterói - RJ. Short Papers Proceedings - Outubro de 2018.

- Ocaña, K.A.C.S.; Pedro, J.C.A.G.; Coelho, M.; Galheigo, M.M.; Osthoff, C. **Avaliação do uso eficiente de algoritmos paralelos de filogenia em supercomputadores.** XXXVIII Congresso da Sociedade Brasileira de Computação - 12^o Brazilian e-Science Workshop (BreSci), Natal - RN, Julho de 2018.

V- Projeto: Pesquisa em Entrada e Saída de dados em ambientes de Supercomputação

Membros : Carla Osthoff Ferreira de Barros - Integrante / Philippe Navaux - Coordenador / Francieli Boito - Integrante / André Ramos Carneiro - Integrante / Jean Luca Bez - Integrante / Bruno Alves Fagundes - Integrante.

Publicações:

- André Ramos Carneiro, Jean Luca Bez, Carla Osthoff, Lucas Mello Schnorr and Philippe O. A. Navaux. **Uncovering I/O Demands on HPC Platforms: Peeking Under the Hood of Santos Dumont-** Journal of Parallel and Distributed Computing (2022 Submitted)
- André Ramos Carneiro, Jean Luca Bez, Carla Osthoff, Lucas Mello Schnorr and Philippe O. A. Navaux. **HPC Data Storage at a Glance: The Santos Dumont Experience.** In: SBAC-PAD 2021- IEEE 33rd International Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing, Belo Horizonte. Proceedings of the SBAC-PAD 2021- IEEE 33rd International Symposium on Computer Architecture and High Performance Computing, 2021.
- Bez, Jean Luca; Ramos Carneiro, André; Slodera Girelli Valéria; Zanon Boito; Alves fagundes, Bruo; Osthoff, Carla; leite da Silva Dias, Pedro; Méhaut, Jean -François; Navaux, Philippe **I/O**

*Performance of the Santos Dumont Supercomputer.
International Journal of High Performance Computing Application.*

PROJETOS FINANCIA:

1) Projeto: Next-generation HPC PROblems and SOLutions

Financiador: Centre de Recherche INRIA Bordeaux Sud-Ouest (FRA) - Auxílio financeiro.

membros: Carla Osthoff Ferreira de Barros - Coordenador / Francieli Boito - Integrante / Micaella Coelho - Integrante / kary Ocana - Integrante / André Ramos Carneiro - Integrante / Bruno Alves Fagundes - Integrant

This project's main goal is to study and characterize the new HPC workload, represented by a set of scientific applications that are important to the LNCC because they are representative of Santos Dumont's workload. This generated knowledge will guide the proposal of monitoring and profiling techniques for applications, and the design of new coordination mechanisms to arbitrate resources in HPC environments.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Alunos envolvidos: Mestrado acadêmico: (2) Doutorado: (1) .

2)Projeto: Utilização de HPC em modelagem de problemas da indústria de petróleo

Financiador(es): Petrobras- SIGITEC

Integrantes: Carla Osthoff Ferreira de Barros - Integrante / Wagner Léo - Coordenador / Micaella Coelho - Integrante / Thiago Teixeira - Integrante / André Ramos Carneiro - Integrante / Bruno Alves Fagundes - Integrante / Frederico Luis Cabral - Integrante.

Descrição: Este projeto tem como finalidade desenvolver otimizações em softwares de modelagem computacional de aplicações da área de óleo e gás visando o aumento da eficiência no seu tempo de execução e também melhor utilização dos recursos computacionais em ambientes heterogêneos de computação de alto desempenho.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Alunos envolvidos: Mestrado acadêmico: (3) Doutorado: (1) .

3) Projeto "Exploring the potential impact on Latin America and Europe"

RISC 2 (<https://www.risc2-project.eu>)