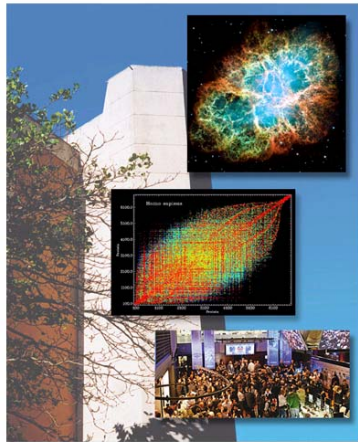


# INCT - Sistemas Complexos

2ª Reunião anual do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia



## Aplicações Tecnológicas da Mecânica Estatística Não-Extensiva

*Márcio P. de Albuquerque*  
*Marcelo P. de Albuquerque*

**Grupo de Computação do CBPF**

**{mpa, marcelo@cbpf.br}**



# Áreas de Atuação e Pessoal

---

- **Processamento Sinais e Imagens**

- I. A. Esquef (UENF)
- Maysa Macedo
- Dário Oliveira
- Aris Anastasiadis (Univ. Patras, GR)
- D. B. Mussi

Segmentação por Entropia  
Segmentação por Entropia Relativa

- **Séries Temporais**

- Elisângela Lopes de Faria
- J. L. González Alfonso (UFES)

- **Processamento Computacional em Paralelo**

- Alexandre Maya
- Nilton Alves Jr. (CBPF)

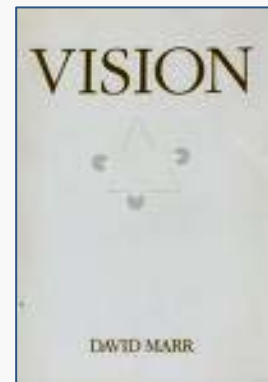
Desenvolvimento de Software

# Visão

---

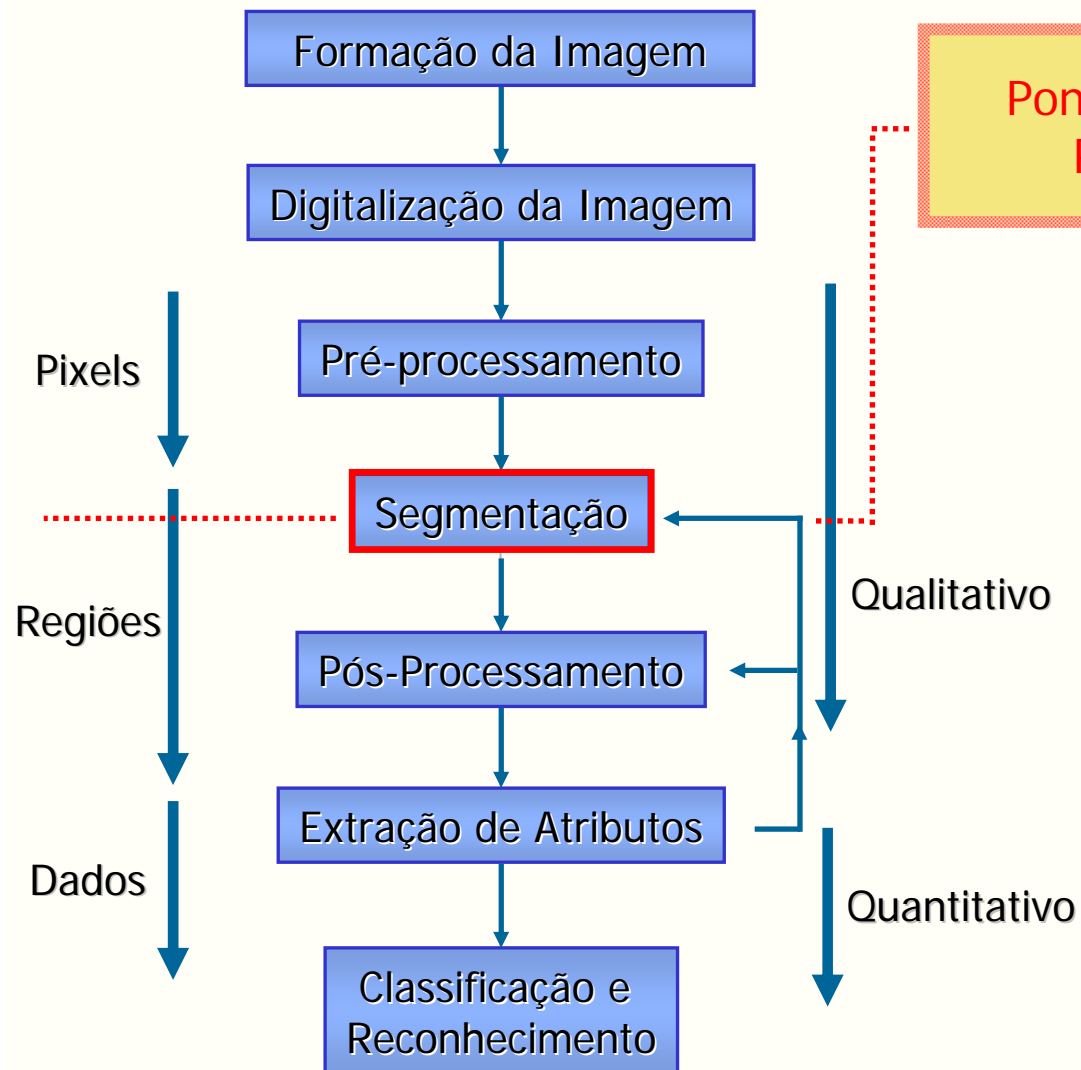
*“Vision is the process of discovering from images what is present in the world, and where it is”.*

*Se somos capazes de identificar o que está ao nosso redor isto significa que de alguma forma nosso cérebro foi capaz de **representar** esta **informação visual**.*



*David Marr - MIT  
“**Vision**”  
as information processing  
New York: Freeman (1982)*

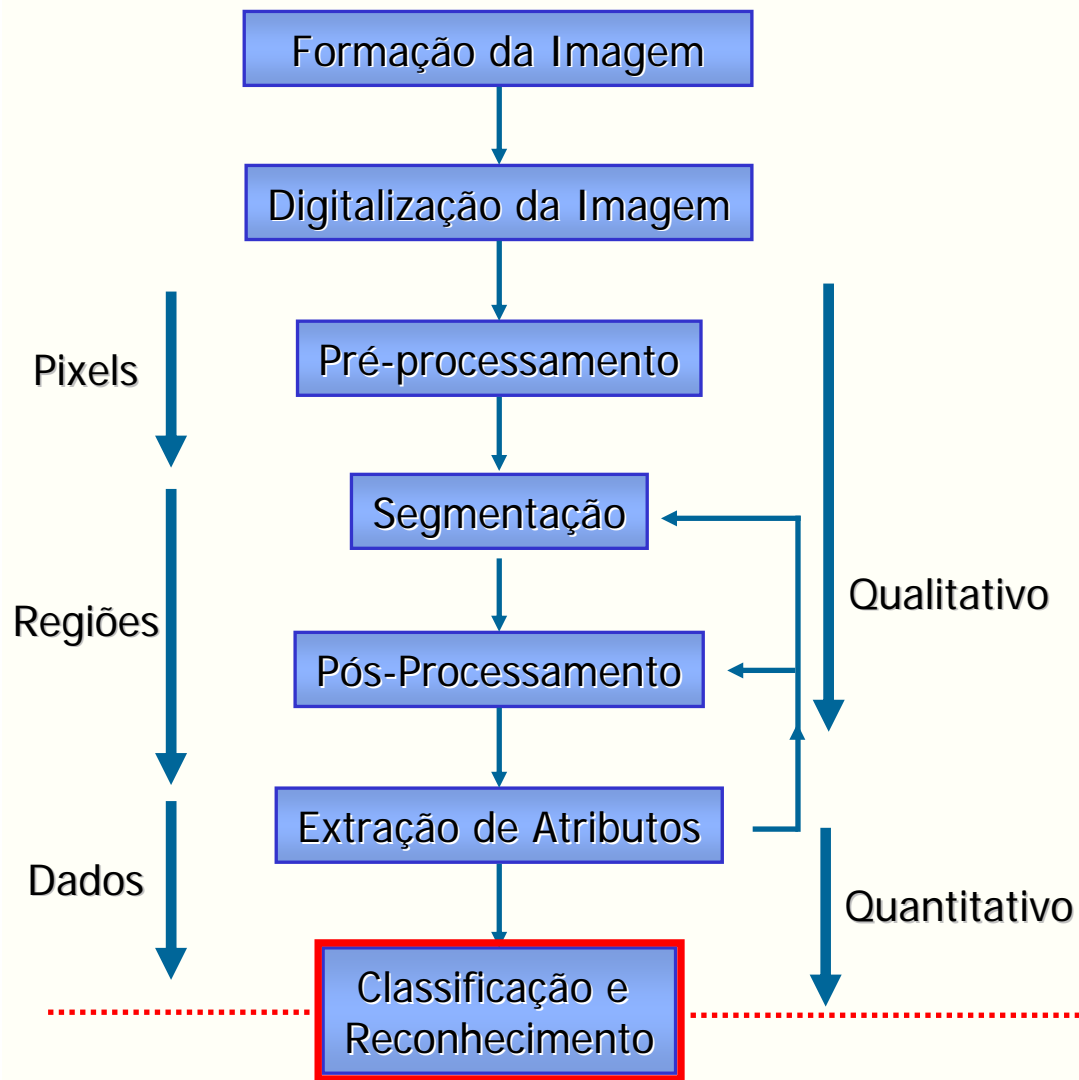
# Processamento de Imagens



## Ponto Crítico do Processo

- ❑ Procura-se **distinguir** os “**objetos**” uns dos outros e do “**fundo**”.
- ❑ **Não existe** um **modelo** formal. É um processo **empírico, semântico** e **adaptativo**.
- ❑ As etapas posteriores dependem da **eficiência** da **identificação** das regiões na imagem.
- ❑ A **segmentação** é **complexa** porque tenta **traduzir** para o computador um **processo cognitivo** extremamente sofisticado realizado através da **visão humana**.

# Processamento de Imagens

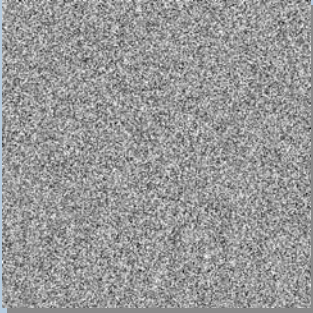


- ❑ Realiza, de modo **automático**, a **"identificação"** dos objetos segmentados.
- ❑ Função **discriminante** – **Parâmetros** ou **atributos** dos objetos.
- ❑ Métodos **Estatísticos**, Técnicas de **Distâncias** e Descrições de **Formas**.


## Conceitos de Entropia em Imagens

**Imagens**  $\left\{ \begin{array}{l} \text{Sistemas Extensivos ?} \\ \text{Sistemas Não Extensivos ?} \end{array} \right.$

**Ruído branco 2D**



**Imagem complexa**



Massie Research Laboratories, Inc.

### Entropia em imagens

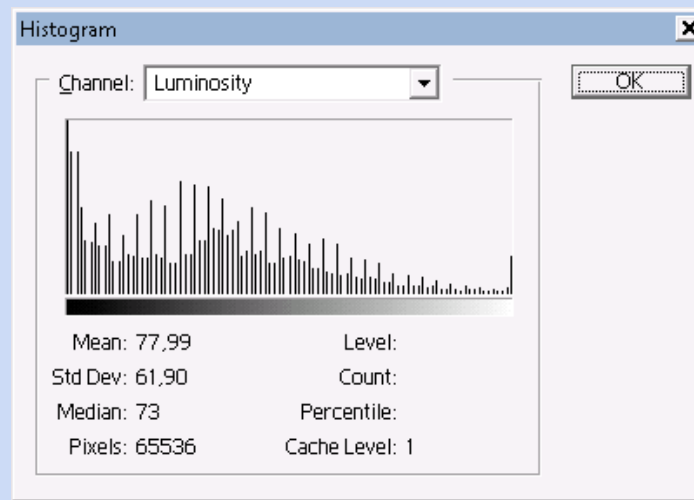
A entropia de uma imagem  $I(x,y)$  pode, por exemplo, ser calculada através do Histograma  $h(k)$  dos níveis de cinza:

$$h_i = \frac{n_i}{n}$$

$$i = (1, \dots, k)$$

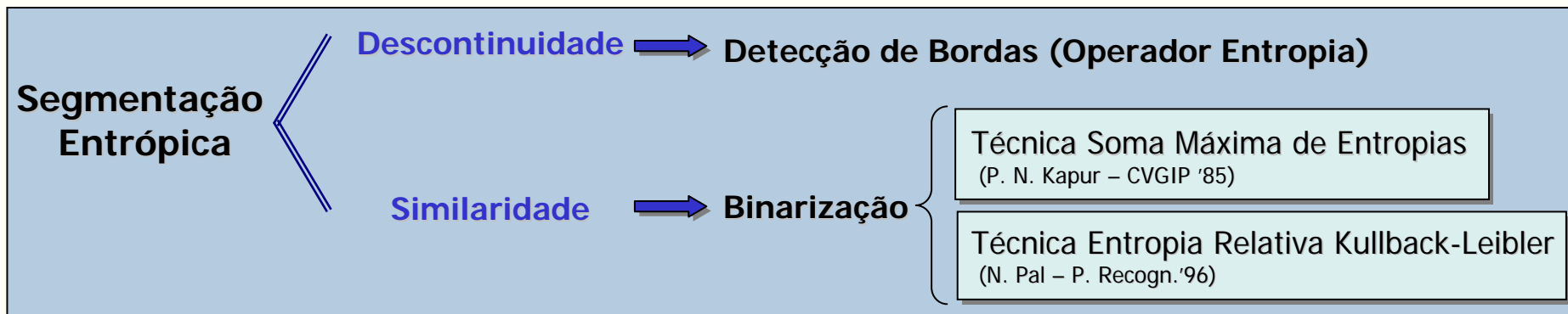
$$h_i \equiv p_i$$

- $k$  = níveis de cinza
- $n_i$  = número de pixels do nível  $i$
- $n$  = número total de pixels da imagem



## Métodos de Segmentação por Entropia Generalizada

O que existe:



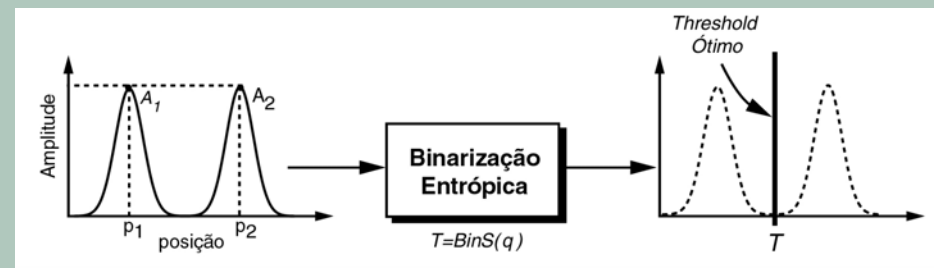
## Métodos de Segmentação por Entropia Generalizada

Binarização de Imagens por Entropia Generalizada

Binarização de Imagens por Entropia Relativa Generalizada

### Técnica de Segmentação

### Binarização de Imagens por Entropia Generalizada



❑ Imagem = Sistema composto por duas classes:

A - Objeto

B - Fundo

❑ Histograma de Luminância – Jogos de probabilidades  $p_A$  e  $p_B$

❑ Função Critério – Soma de entropias (Propriedade Pseudoaditiva)



## Método de Segmentação por Entropia Generalizada

### → Descrição teórica

Imagem  $I(x, y)$

$$h_i \equiv p_i \rightarrow p_A + p_B$$

$$\sum_{i=1}^k p_i = 1$$

• Probabilidades Cumulativas

$$P^A = \sum_{i=1}^t p_i \quad \text{e} \quad P^B = \sum_{i=t+1}^k p_i$$

• Probabilidades do objeto

$$p_A : \frac{p_1}{P^A}, \frac{p_2}{P^A}, \dots, \frac{p_t}{P^A}$$

• Probabilidades do fundo

$$p_B : \frac{p_1}{P^B}, \frac{p_2}{P^B}, \dots, \frac{p_k}{P^B}$$

Pseudo aditividade

$$S_q(A + B) = S_q(A) + S_q(B) + (1 - q) \cdot S_q(A) \cdot S_q(B)$$

$$S_q^A(t) = \frac{1 - \sum_{i=1}^t (p_A)^q}{q - 1}$$

→ Entropia associada aos pixels pretos

$$S_q^B(t) = \frac{1 - \sum_{i=t+1}^k (p_B)^q}{q - 1}$$

→ Entropia associada aos pixels brancos

$$S_q(t) = \frac{1 - \sum_{i=1}^t (p_A)^q}{q - 1} + \frac{1 - \sum_{i=t+1}^k (p_B)^q}{q - 1} + (1 - q) \cdot \frac{1 - \sum_{i=1}^t (p_A)^q}{q - 1} \cdot \frac{1 - \sum_{i=t+1}^k (p_B)^q}{q - 1}$$

O valor de  $t$  que maximiza a função  $S_q(t)$  é o nível de threshold ótimo.

$$t_{opt} = \operatorname{argmax} [S_q^A(t) + S_q^B(t) + (1 - q) \cdot S_q^A(t) \cdot S_q^B(t)]$$

## Método de Segmentação por Entropia Generalizada

### → Exemplo de Aplicação do Método

- Valor do parâmetro de Não Extensividade

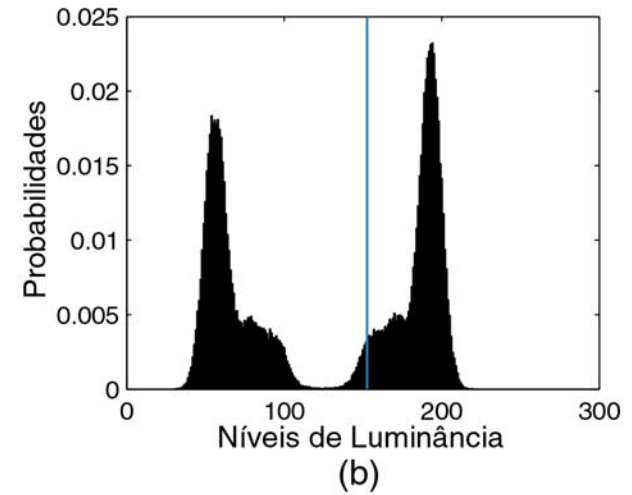
$$q = 0.85$$

- Ponto de corte definido

$$t = 133$$



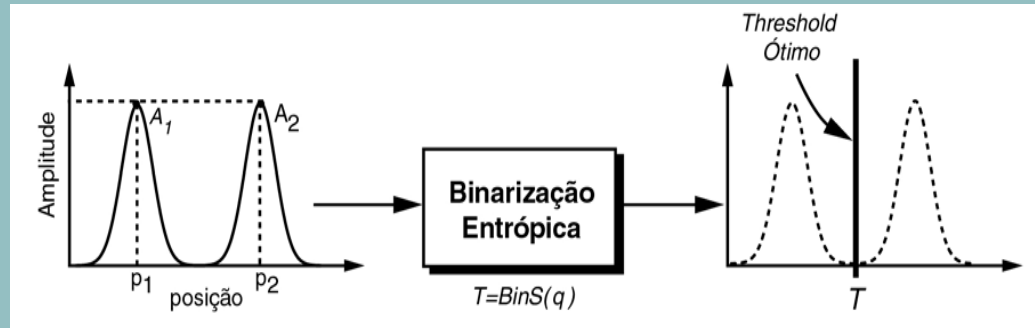
(a)



## Método de Segmentação por Entropia Generalizada

### → Metodologia de Aplicação dos Métodos de Binarização

#### Segmentação Ótima



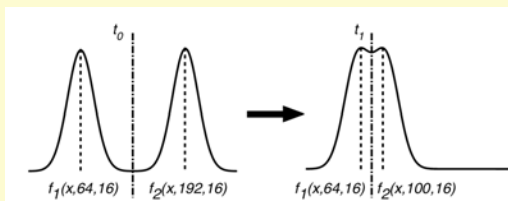
- Métodos Estatísticos – **histograma** da imagem.
- **Dificuldade** de **avaliação** da eficiência em **imagens reais**.
- Metodologia - **evolução** de **histogramas simulados**.
  - **Quatro casos** abordados.
- Avaliação da **função critério** e do **ponto de corte**.
- Aplicação em **imagem reais**.

# Métodos de Segmentação por Entropia Generalizada

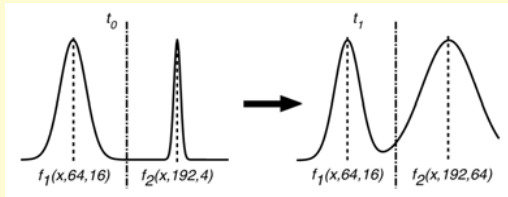
## Quatro Casos Simulados

$$f(x, p, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left(-\frac{(x-p)^2}{2\sigma^2}\right)$$

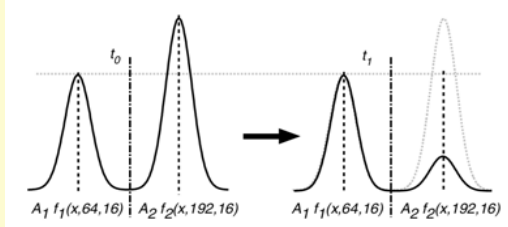
**Caso 1**  
Posição do Pico



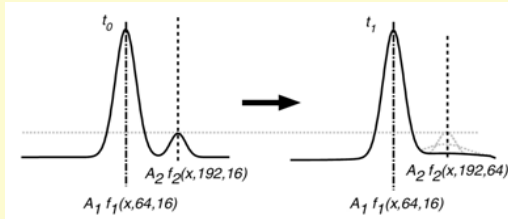
**Caso 2**  
Largura do Pico



**Caso 3**  
Altura do Pico

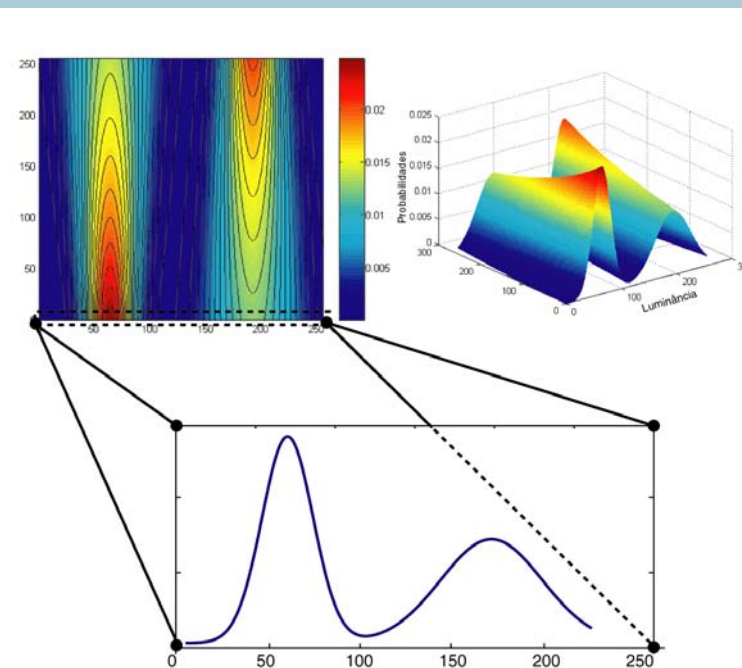


**Caso 4**  
Picos próximos  
(Objeto imerso em Ruído)



## Evolução do Histograma

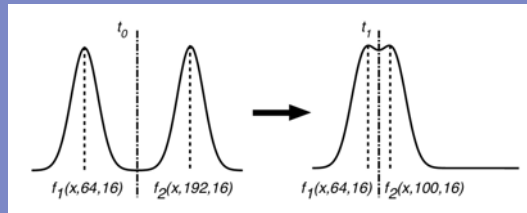
Gráficos de Superfície para ilustrar o comportamento dos métodos nos casos



# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

## → Resultados das Simulações

### CASO 1 Posição do Pico



$q = 0.25$

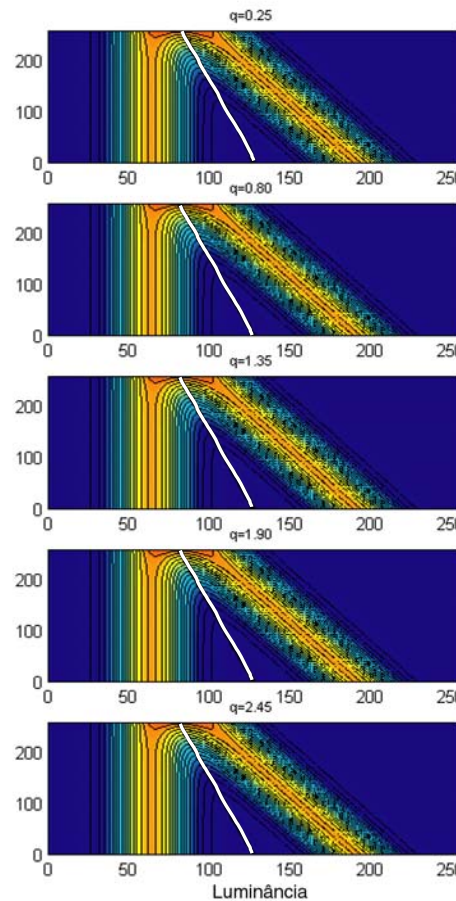
$q = 0.80$

$q = 1.35$

$q = 1.90$

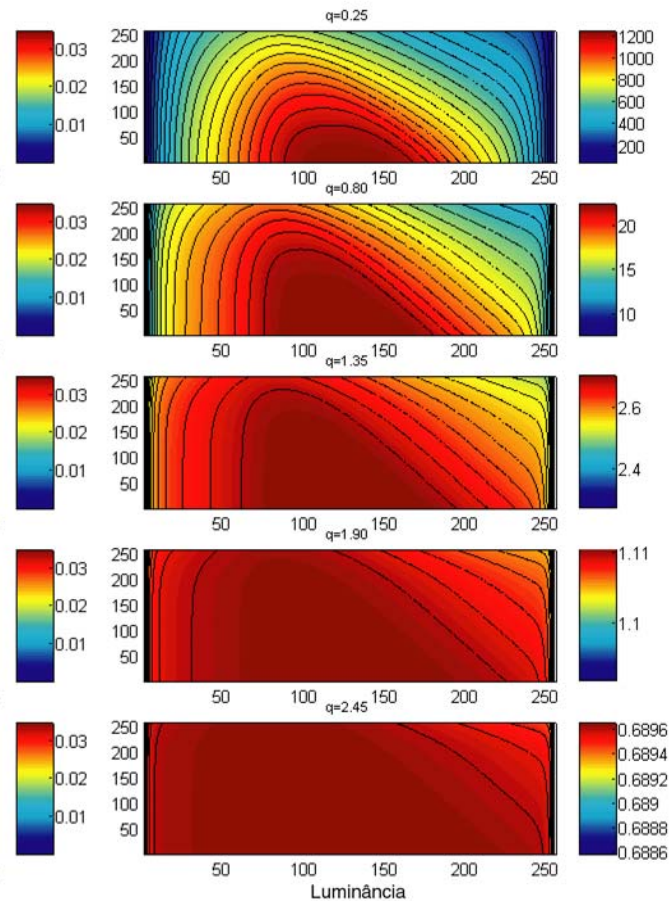
$q = 2.45$

### Histogramas



(a)

### Entropias

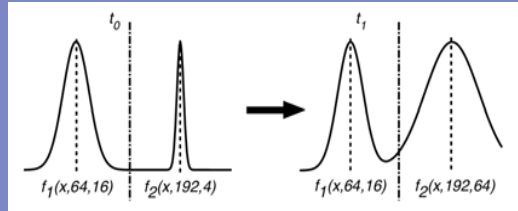


(b)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

## → Resultados das Simulações

### CASO 2 Largura do Pico



q = 0.25

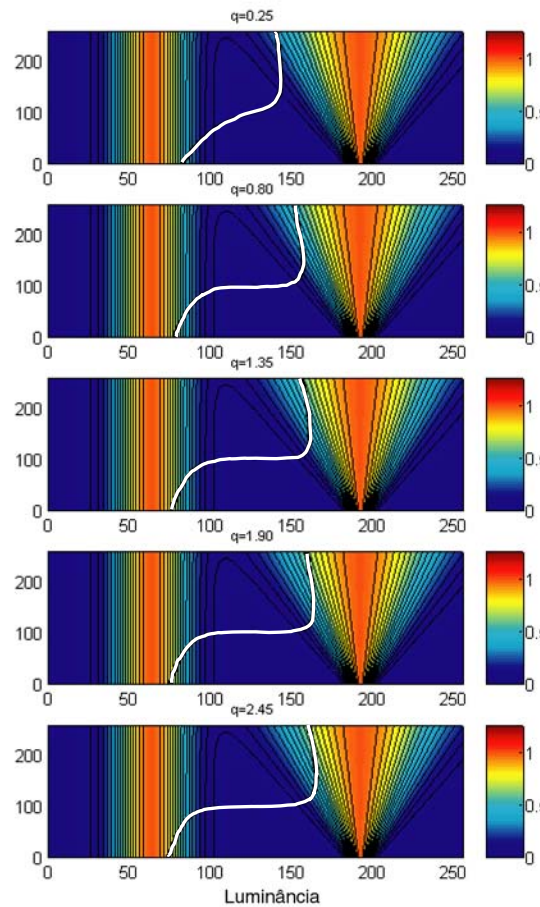
q = 0.80

q = 1.35

q = 1.90

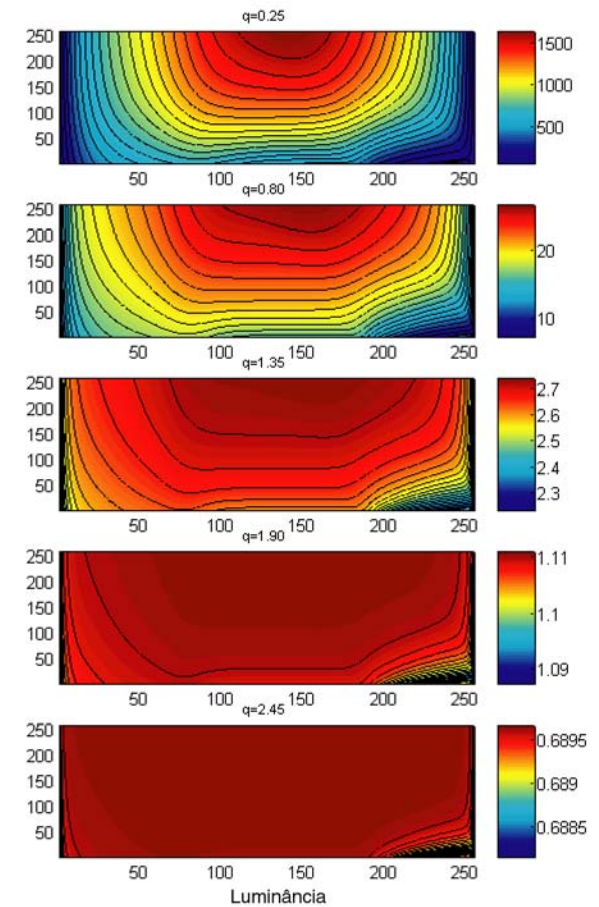
q = 2.45

### Histogramas



(a)

### Entropias

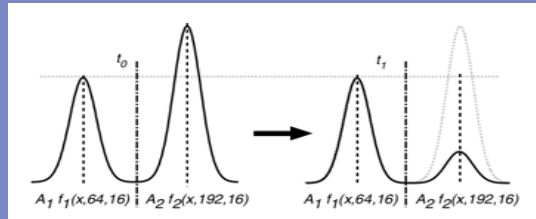


(b)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

## → Resultados das Simulações

### CASO 3 Altura do Pico



q = 0.25

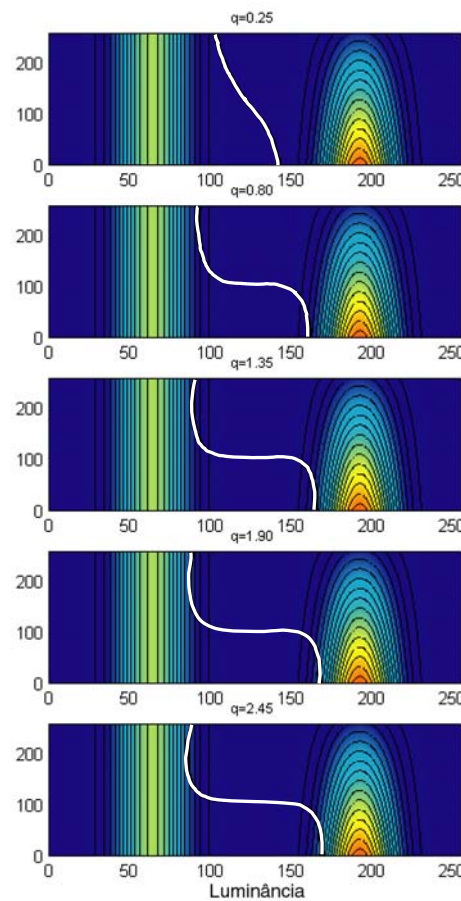
q = 0.80

q = 1.35

q = 1.90

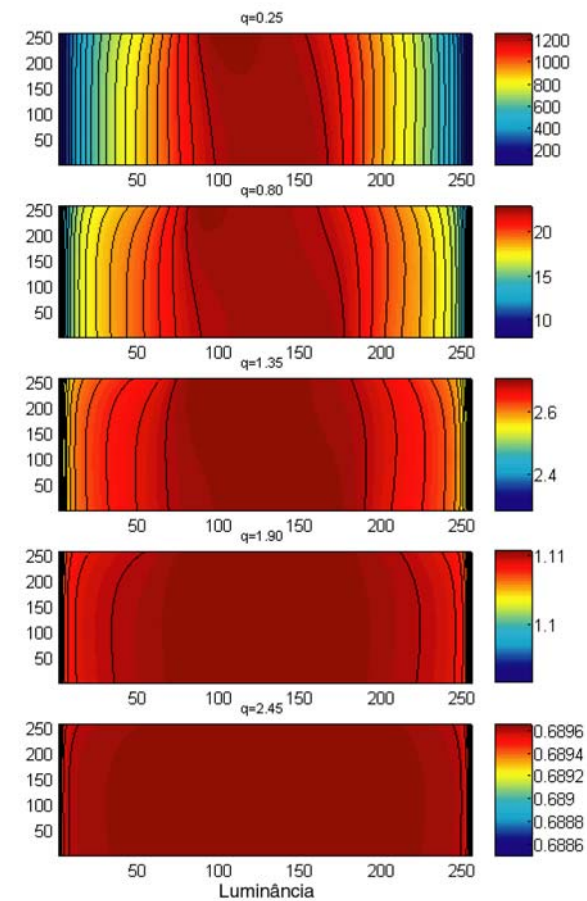
q = 2.45

### Histogramas



(a)

### Entropias

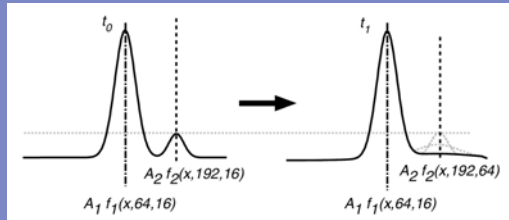


(b)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

## → Resultados das Simulações

### CASO 4 Picos próximos (Objeto imerso em Ruído)



$q = 0.25$

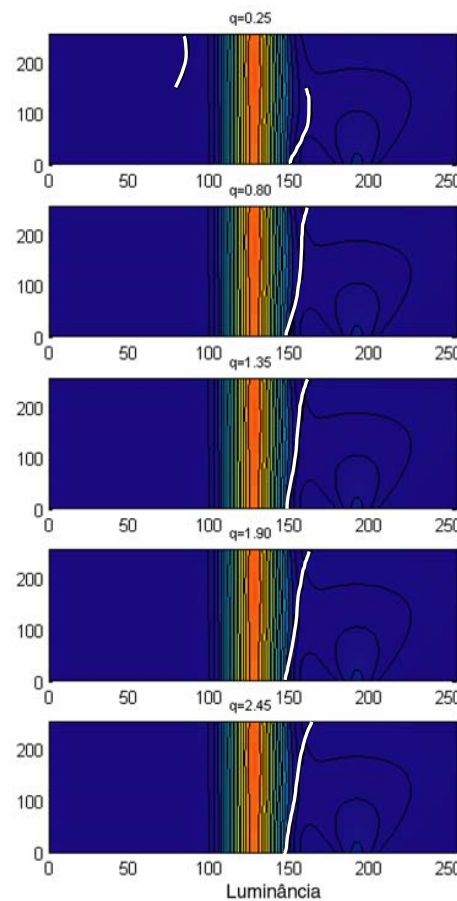
$q = 0.80$

$q = 1.35$

$q = 1.90$

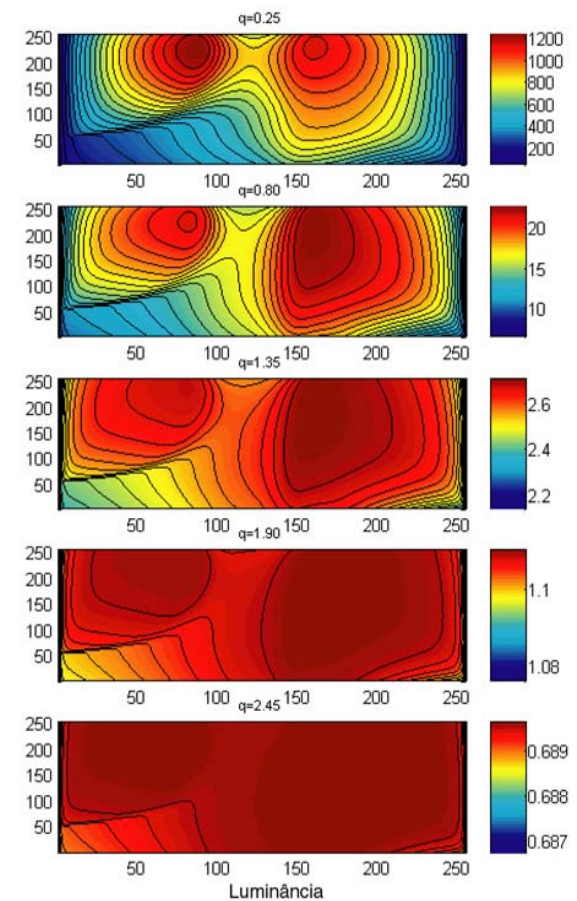
$q = 2.45$

### Histogramas



(a)

### Entropias



(b)



## Método de Segmentação por Entropia Generalizada

---

### → Resultados em Imagens

❑ Aplicação em Imagens Reais - 4 casos simulados

❑ Comparação com Métodos Clássicos Não Entrópicos

• Metodo *Two Peaks*

Binarização pela forma do Histograma

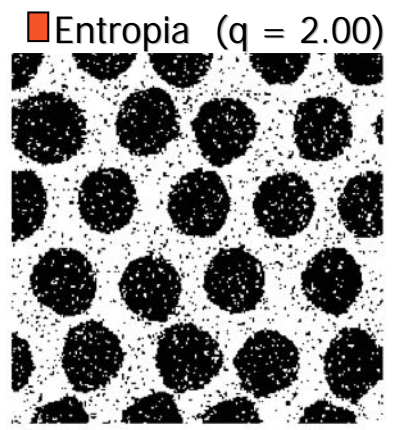
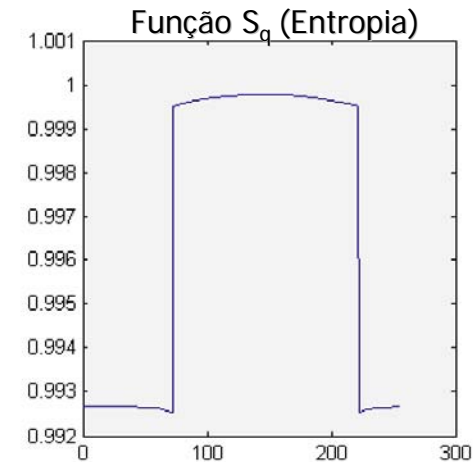
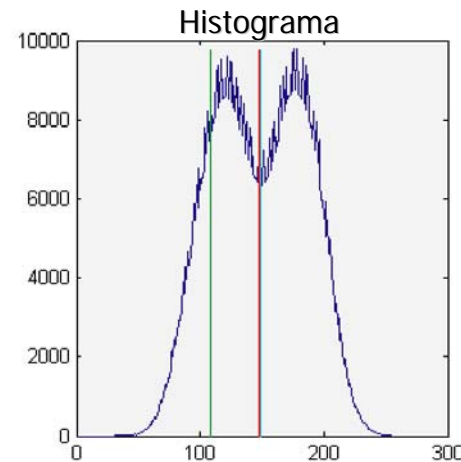
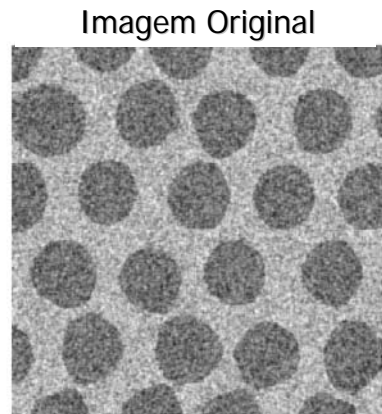
• Metodo *Iterative Selection*

Binarização por médias de regiões de luminância

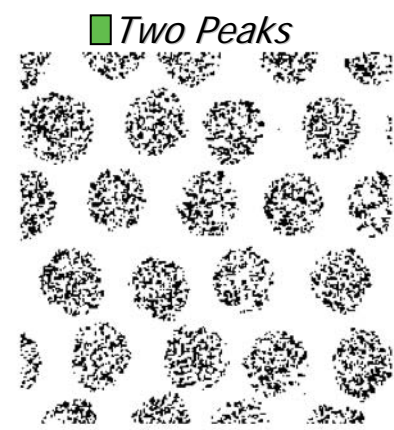
# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

## → Resultados em Imagens

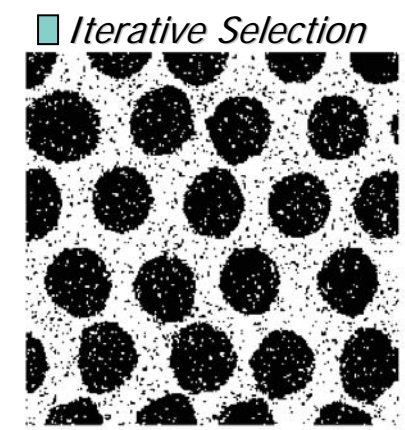
**CASO 1** - Imagem de uma amostra de Ferrofluido observada por iluminação transmitida. (*Petit et al - JMMM*)



(t = 147)



(t = 108)



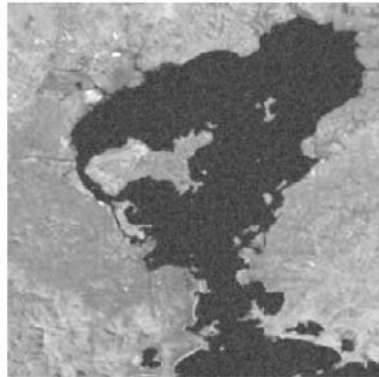
(t = 149)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

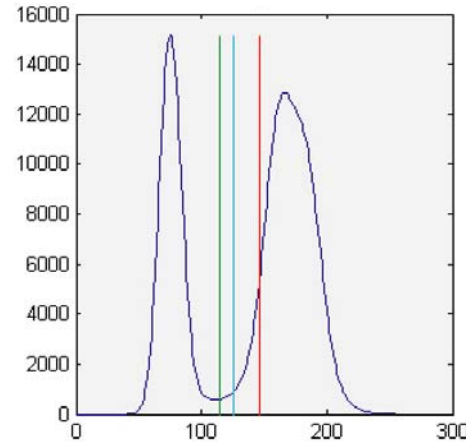
## → Resultados em Imagens

**CASO 2** - Imagem da região metropolitana do Rio de Janeiro. (*Landsat 7 - Embrapa*)

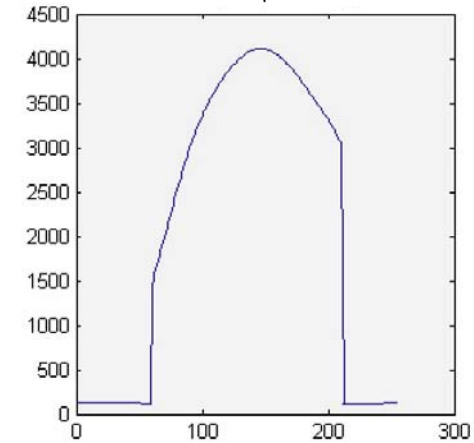
Imagem Original



Histograma



Função  $S_q$  (Entropia)



Entropia ( $q = 0.10$ )



( $t = 146$ )

Two Peaks



( $t = 115$ )

Iterative Selection



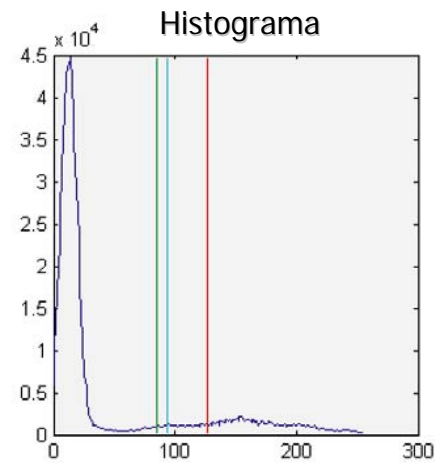
( $t = 126$ )

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

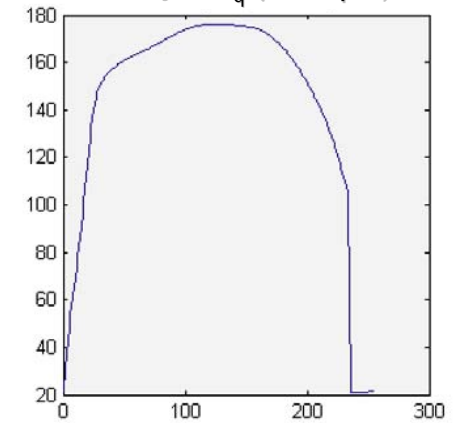
## → Resultados em Imagens

**CASO 2+3** - Imagem de uma flor com Iluminação irregular. (Gonzalez/Woods)

Imagem Original



Função  $S_q$  (Entropia)

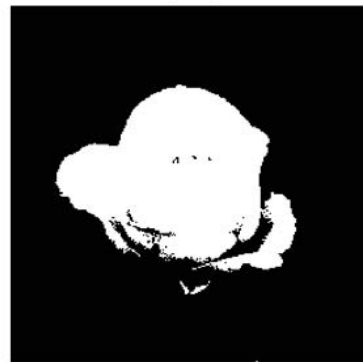


Entropia ( $q = 0.50$ )



(t = 127)

Two Peaks



(t = 85)

Iterative Selection



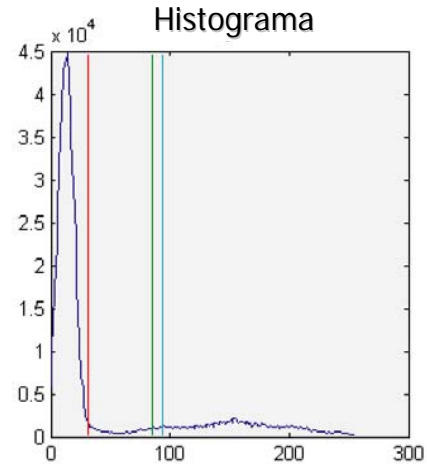
(t = 94)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

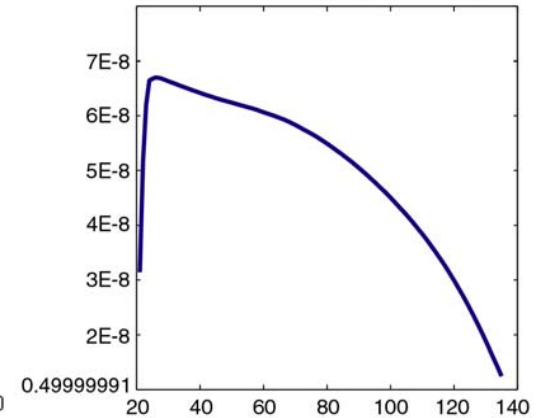
## → Resultados em Imagens

**CASO 2+3** - Imagem de uma flor com Iluminação irregular. (Gonzalez/Woods)

Imagem Original



Função  $S_q$  (Entropia)

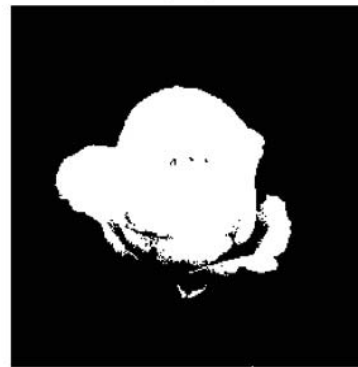


Entropia ( $q = 3.00$ )



(t = 31)

Two Peaks



(t = 85)

Iterative Selection



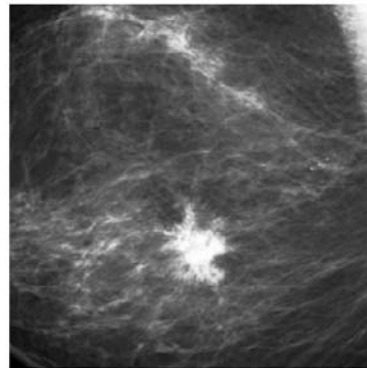
(t = 94)

# Método de Segmentação por Entropia Generalizada

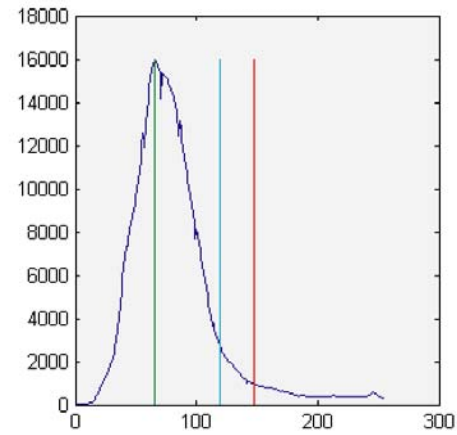
## → Resultados em Imagens

**CASO 4** - Imagem de um tumor em uma mamografia. (MAMMOGRAPHIC IMAGE ANALYSIS SOCIETY /2000)

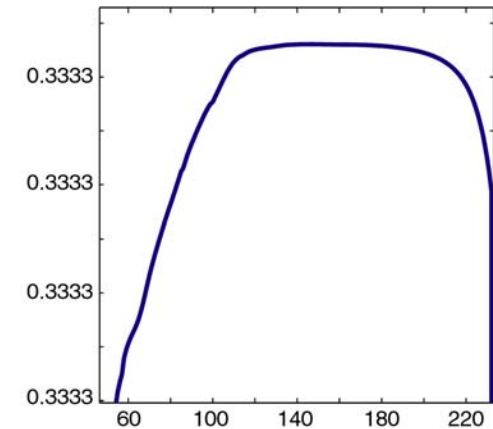
Imagem Original



Histograma



Função  $S_q$  (Entropia)

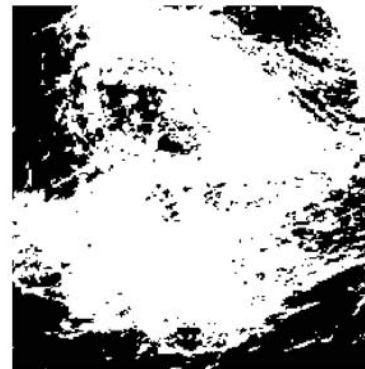


Entropia ( $q = 2$ )



(t = 147)

Two Peaks



(t = 65)

Iterative Selection



(t = 119)

## Método de Segmentação por Entropia Generalizada

---

### → Observações sobre a técnica

- ❑ **Extensão** do método proposto por Kapur.

  - "*An automatic method to enhance microcalcifications using Normalized Tsallis entropy*", Mohanalin et al – Signal Processing (Elsevier) 2010.

  - "*Brain tissue segmentation using  $q$ -entropy in multiple sclerosis magnetic resonance images*" -Diniz, P.R.B. et al - Brazilian Journal of Medical and Biological Research 43 (1) - 2010

- ❑ O método apresenta **resultados melhores** em comparação ao convencional, em alguns casos específicos (Caso 3 e 4).

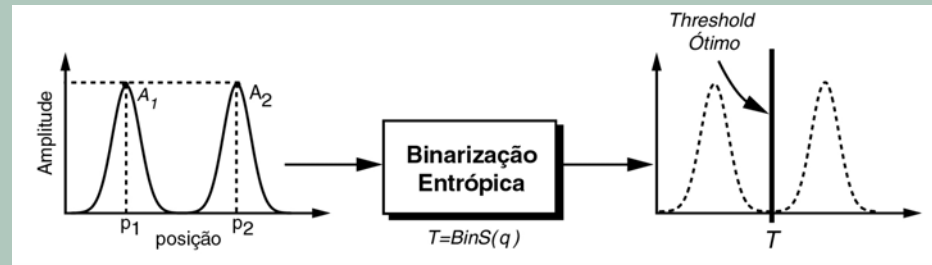
- ❑ Resultados **muito melhores** para o caso de "**objetos**" pouco prováveis – "*objeto*" está imerso no pico do "*fundo*" da imagem.

- ❑ Ponto de corte tende para gaussiana de maior largura - **limitação** da técnica.

- ❑ O **parâmetro** de não extensividade  $q$  pode ser considerado **um ajuste** no processo de segmentação.

### Técnica de Segmentação

### Binarização de imagens por Entropia Relativa Generalizada



- ❑ Medida de distância estatística:  $\left\{ \begin{array}{l} \rho - \text{Histograma de luminância} \\ \rho' - \text{Modelo teórico de histograma} \end{array} \right.$
- ❑ Entropia Relativa Kullback-Leibler Generalizada (ERG)
- ❑ Função Critério – Minimização da Versão Simétrica da ERG



## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Método Binarização por Entropia Relativa Generalizada

#### Entropia Relativa em Sistemas de Informação

(Divergência Direta Kullback-Leibler ou Divergência  $I$ )

- ❑ Medida de distância teórica entre dois jogos de probabilidades
- ❑ Dado dois conjuntos de eventos com probabilidades  $p$  e  $p'$

• Diferença de informação:  $\Delta I_i = -(\log p'_i - \log p_i)$

• Taxa média de informação modificada (Ganho de informação Kullback-Leibler):

$$D(p : p') = \sum_i p_i \cdot \Delta I_i = \sum_i p_i \cdot \log \frac{p_i}{p'_i}$$

#### Entropia Relativa Generalizada

[L. Borland, A. Plastino and C. Tsallis – J. Math. Phys. '98]

• Diferença de informação:  $\Delta I_i^q = \left[ \frac{1}{(1-q)} \right] \cdot [(1 - p_i^{1-q}) - (1 - p_i'^{1-q})]$

• Ganho de informação Kullback-Leibler Generalizado :

$$D_{KL_q}(p : p') = \sum_i \frac{p_i^q}{1-q} \cdot (p_i^{1-q} - p_i'^{1-q}) = \sum_i p_i \cdot \log_q \frac{p_i}{p'_i}$$

Divergência J - Generalizada  
Versão simétrica da  $D_{KLq}$

$$D_q(p : p') = \sum_i p_i \cdot \log_q \frac{p_i}{p'_i} + \sum_i p'_i \cdot \log_q \frac{p'_i}{p_i}$$

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Método Binarização por Entropia Relativa Generalizada

Imagem

Histograma – Normalização ( $P_t$ )

Objeto

$$p_i^A = \frac{h_i}{P_t}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, t; \quad P_t = \sum_i^t h_i$$

$$p_A = \{p_1^A, p_2^A, p_3^A, \dots, p_t^A\}$$

Fundo

$$p_i^B = \frac{h_i}{1 - P_t}, \quad i = t + 1, t + 2, t + 3, \dots, k;$$

$$p_B = \{p_{t+1}^B, p_{t+2}^B, p_{t+3}^B, \dots, p_k^B\}$$

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

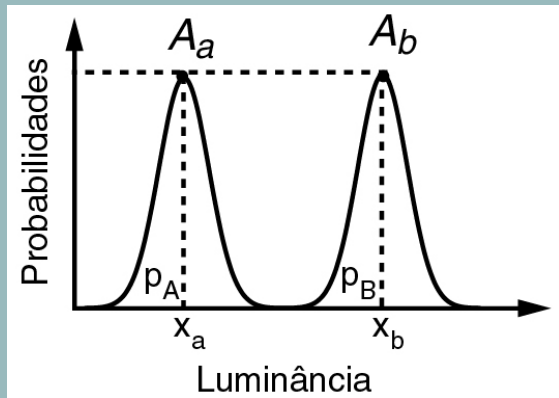
### → Método Binarização por Entropia Relativa Generalizada

Modelo

Histograma do Modelo – Distribuição Gaussiana

**Objeto**  $p'_i{}^A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_a} \exp\left[-\frac{(x-x_a)^2}{2\sigma_a^2}\right] \quad i = 1, 2, 3, \dots, t \implies p'_A = \{p'_1{}^A, p'_2{}^A, p'_3{}^A, \dots, p'_t{}^A\}$

**Fundo**  $p'_i{}^B = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_b} \exp\left[-\frac{(x-x_b)^2}{2\sigma_b^2}\right] \quad i = t+1, t+2, t+3, \dots, k; \implies p'_B = \{p'_{t+1}{}^B, p'_{t+2}{}^B, p'_{t+3}{}^B, \dots, p'_k{}^B\}$



**Posição**

$$x_a = \operatorname{argmax}(h_i) \quad i = 1, 2, 3, \dots, t;$$

$$x_b = \operatorname{argmax}(h_i) \quad i = t+1, t+2, t+3, \dots, k;$$

**Desvio Padrão**

$$\sigma_a = \operatorname{arg}(p'_i{}^A = \hat{\sigma})$$

$$\sigma_b = \operatorname{arg}(p'_i{}^B = \hat{\sigma})$$

onde  $\hat{\sigma} \approx 0.606$

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Método Binarização por Entropia Relativa Generalizada

**Imagem**

$$p_A = \{p_1^A, p_2^A, p_3^A, \dots, p_t^A\}$$

$$p_B = \{p_{t+1}^B, p_{t+2}^B, p_{t+3}^B, \dots, p_k^B\}$$

**Modelo**

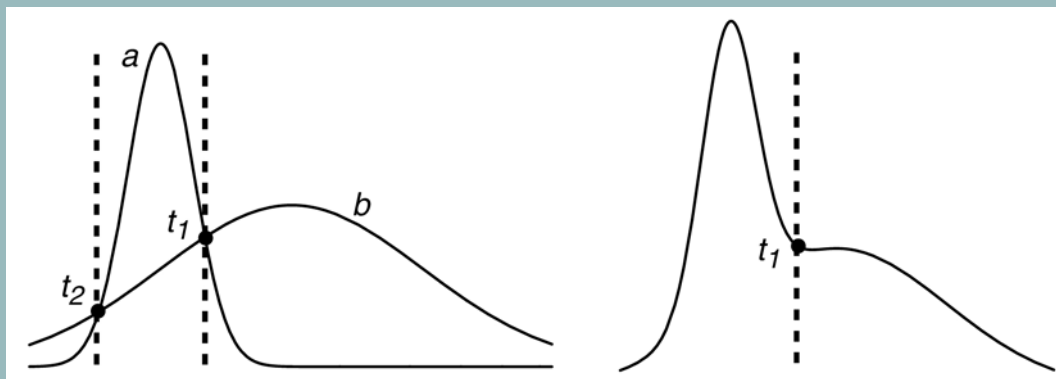
$$p'_A = \{p'_1{}^A, p'_2{}^A, p'_3{}^A, \dots, p'_t{}^A\}$$

$$p'_B = \{p'_{t+1}{}^B, p'_{t+2}{}^B, p'_{t+3}{}^B, \dots, p'_k{}^B\}$$

**Função Critério**  $D_q(t) = D_q(p_A : p'_A) + D_q(p'_A : p_A) + D_q(p_B : p'_B) + D_q(p'_B : p_B)$

$t_{\text{ótimo}}$  = ponto de encontro das gaussianas

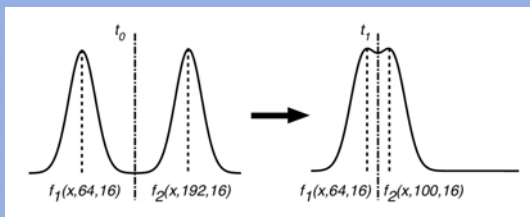
$$\hat{t}_{1,2} = \frac{x_b \sigma_a^2 - x_a \sigma_b^2 \mp \sigma_a \sigma_b \sqrt{(x_a - x_b)^2 - 2 \log\left(\frac{A_a}{A_b}\right) (\sigma_a^2 + \sigma_b^2)}}{\sigma_a^2 - \sigma_b^2}$$



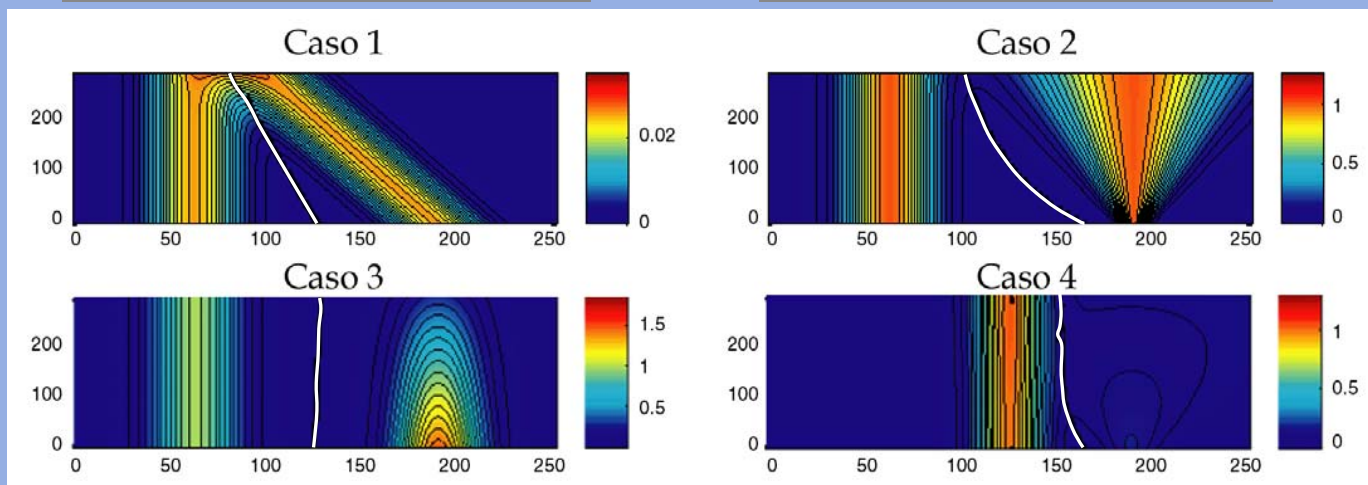
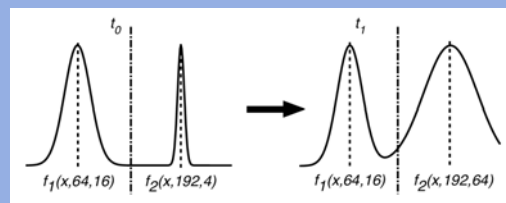
# Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

## → Resultados das Simulações

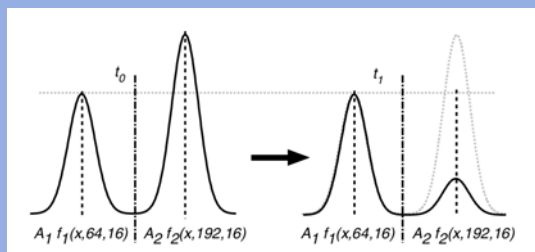
**Caso 1**  
Posição do Pico



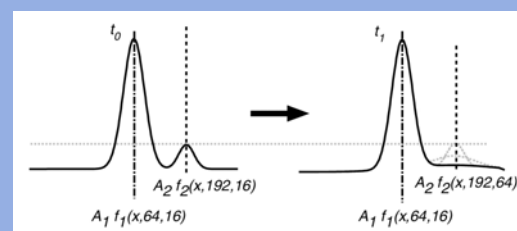
**Caso 2**  
Largura do Pico



**Caso 3**  
Altura do Pico



**Caso 4**  
Picos próximos  
(Objeto imerso em Ruído)

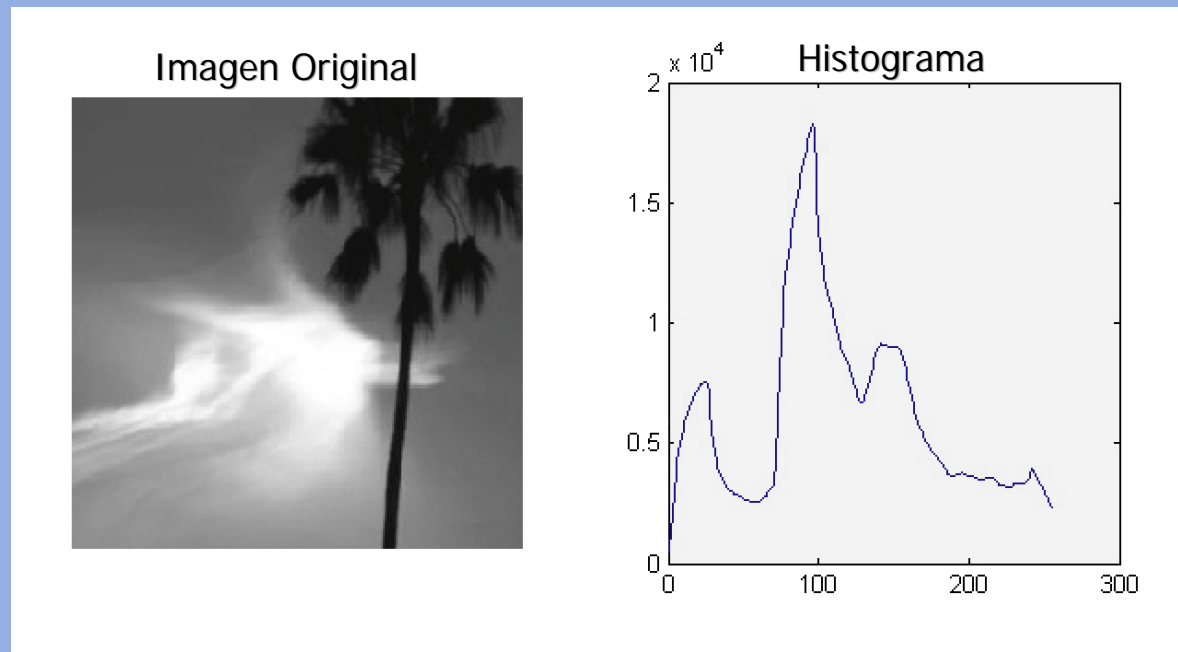


Simulações não apresentam variações do ponto de corte em função do parâmetro  $q$

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Resultados em Imagens

#### A influência do $q$ nos Resultados em imagens



- Imagem com distribuição **não** gaussiana
- Dependência em relação ao parâmetro  $q$
- Distância mínima alterada

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Resultados em Imagens

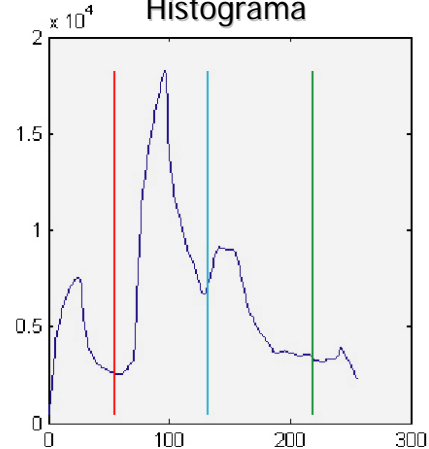
$$D_q(p : p') = \sum_i \frac{p_i^q}{1-q} \cdot (p_i^{1-q} - p_i'^{1-q})$$

### A influência do $q$ nos Resultados em imagens

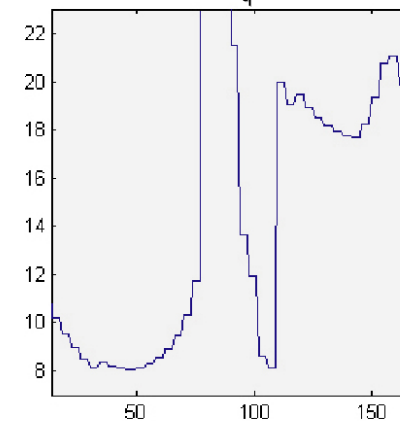
Imagem Original



Histograma



Função  $D_q$  (ERG)

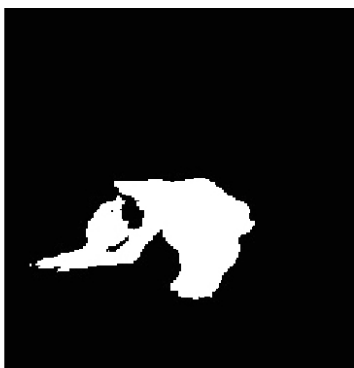


■ Entropia ( $q = 1.10$ )



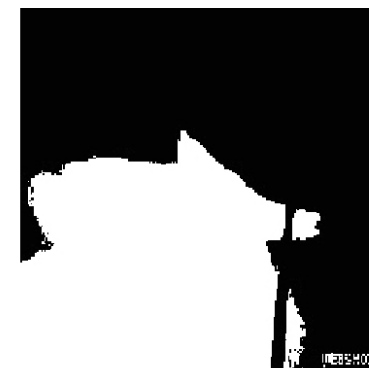
t = 54

■ *Two Peaks*



t = 218

■ *Iterative Selection*



t = 132

## Método de Segmentação por Entropia Relativa Generalizada

### → Observações sobre os Resultados e Situação Atual

- ❑ Método de segmentação **robusto** para várias classes de imagens.
- ❑ Introdução de um "Erro" para a segmentação.
- ❑ PI0401683-1/INPI – *"Processo de binarização de imagens digitais utilizando entropia relativa generalizada"* (2006).

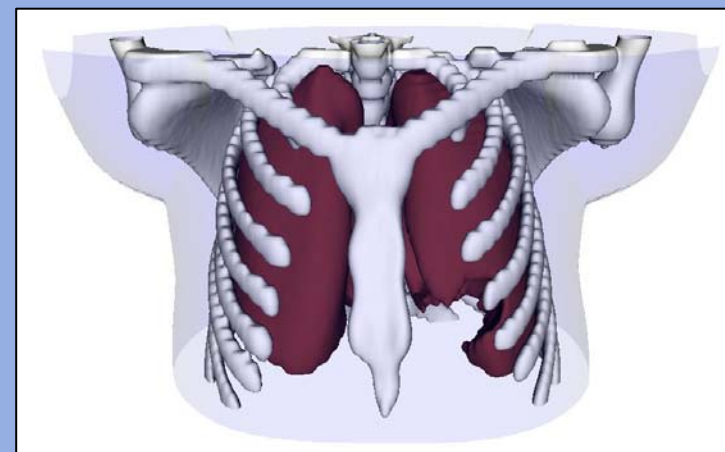


### Aplicação em Calibração de Instrumentos e Reconstrução 3D

Processamento de Imagens para extrair parâmetros como cavidade torácica e áreas de tecido ósseo e de tecido mole com o objetivo final de calibrar aparelhos de raio-x.

Segmentação de Tecido Ósseo e Mole do Tórax e da Cavidade Torácica.

$q=0,9$



Reconstrução volumétrica (3D)

Colaboração: UNESP/Fac. Medicina de Botucatu e CBPF



# Áreas de Atuação e Pessoal

---

- **Processamento Sinais e Imagens**

- I. A. Esquef (UENF)
- Maysa Macedo
- Dário Oliveira
- Aris Anastasiadis (Univ. Patras, GR)
- D. B. Mussi

Segmentação por Entropia  
Segmentação por Entropia Relativa

- **Séries Temporais**

- Elisângela Lopes de Faria
- J. L. González Alfonso (UFES)

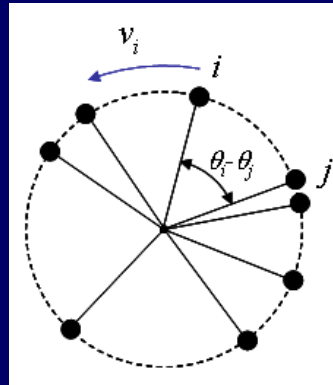
- **Processamento Computacional em Paralelo**

- Alexandre Maya
- Nilton Alves Jr. (CBPF)

Desenvolvimento de Software

# Projeto NExtComp- $\pi$

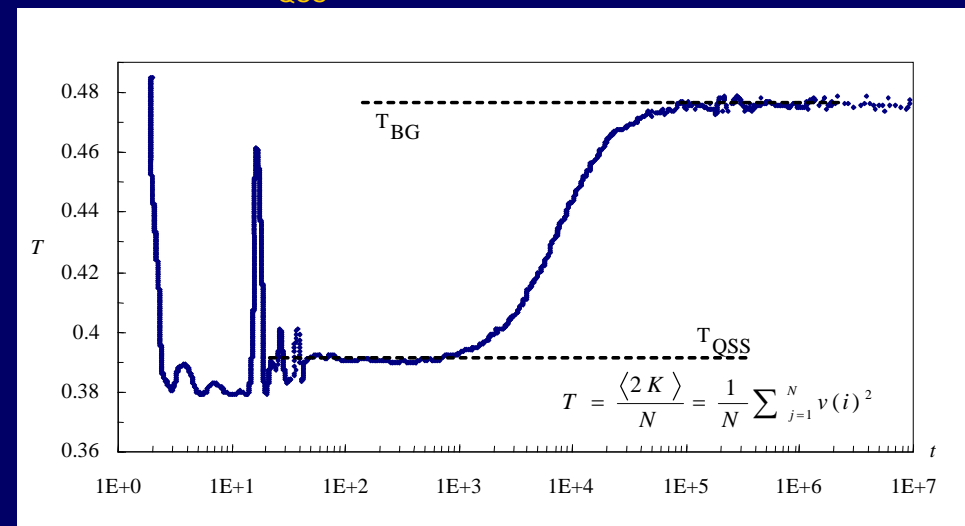
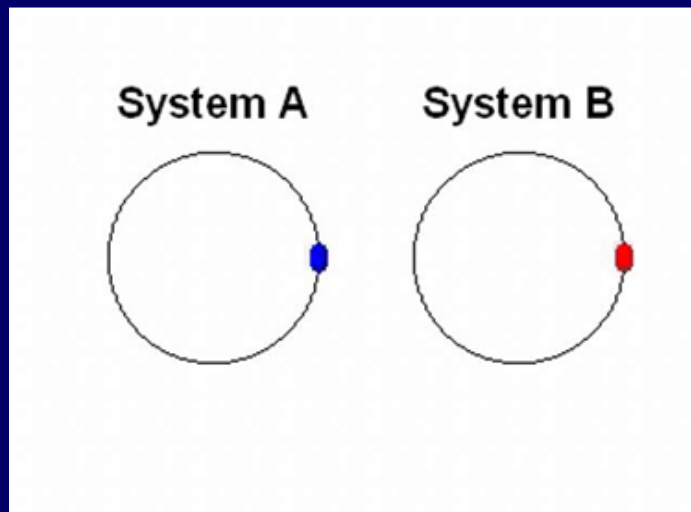
Software para Simulação computacional de sistemas com interação de longo alcance



$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^N \frac{v_{Ai}^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i^A - \theta_j^A)] + \\
 & + l \sum_{k=1}^N [1 - \cos(\theta_k^A - \theta_k^B)] + \\
 & + \sum_{i=1}^N \frac{v_{Bi}^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i^B - \theta_j^B)]
 \end{aligned}$$

Dois Sistemas formados por N rotores planares clássicos

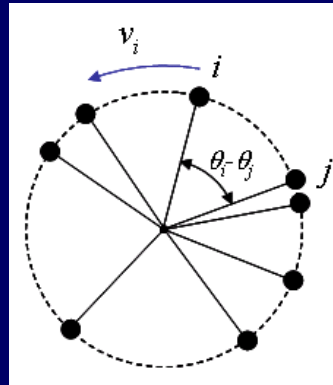
Estudar a interação entre dois ou mais sistemas de rotores a partir de um valor de  $t$  no estado quase-estacionário  $T_{QSS}$



Objetivo final das simulações é provar que o principio zero da termodinâmica também funciona para sistemas em estados quase-estacionários

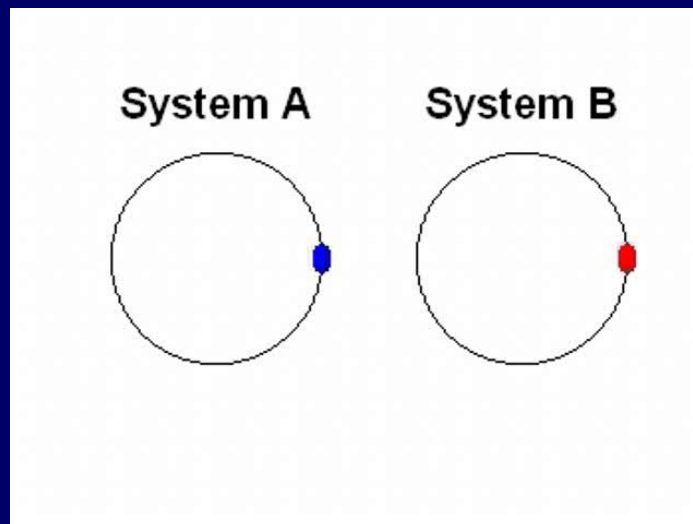
# Projeto NExtComp- $\pi$

Software para Simulação computacional de sistemas com interação de longo alcance

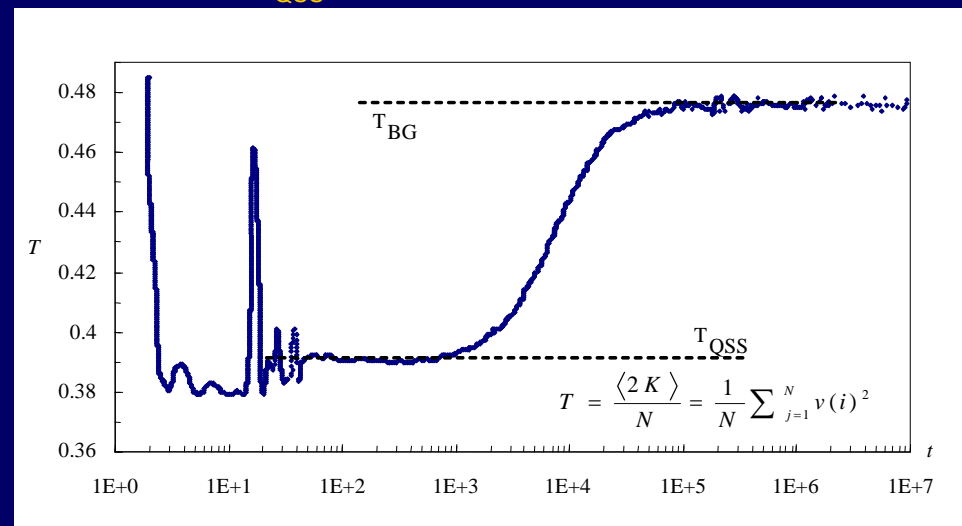


$$H = \sum_{i=1}^N \frac{v_{Ai}^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i^A - \theta_j^A)] + \\ + l \sum_{k=1}^N [1 - \cos(\theta_k^A - \theta_k^B)] + \\ + \sum_{i=1}^N \frac{v_{Bi}^2}{2} + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [1 - \cos(\theta_i^B - \theta_j^B)]$$

Dois Sistemas formados por N rotores planares clássicos



Estudar a interação entre dois ou mais sistemas de rotores a partir de um valor de  $t$  no estado quase-estacionário  $T_{QSS}$

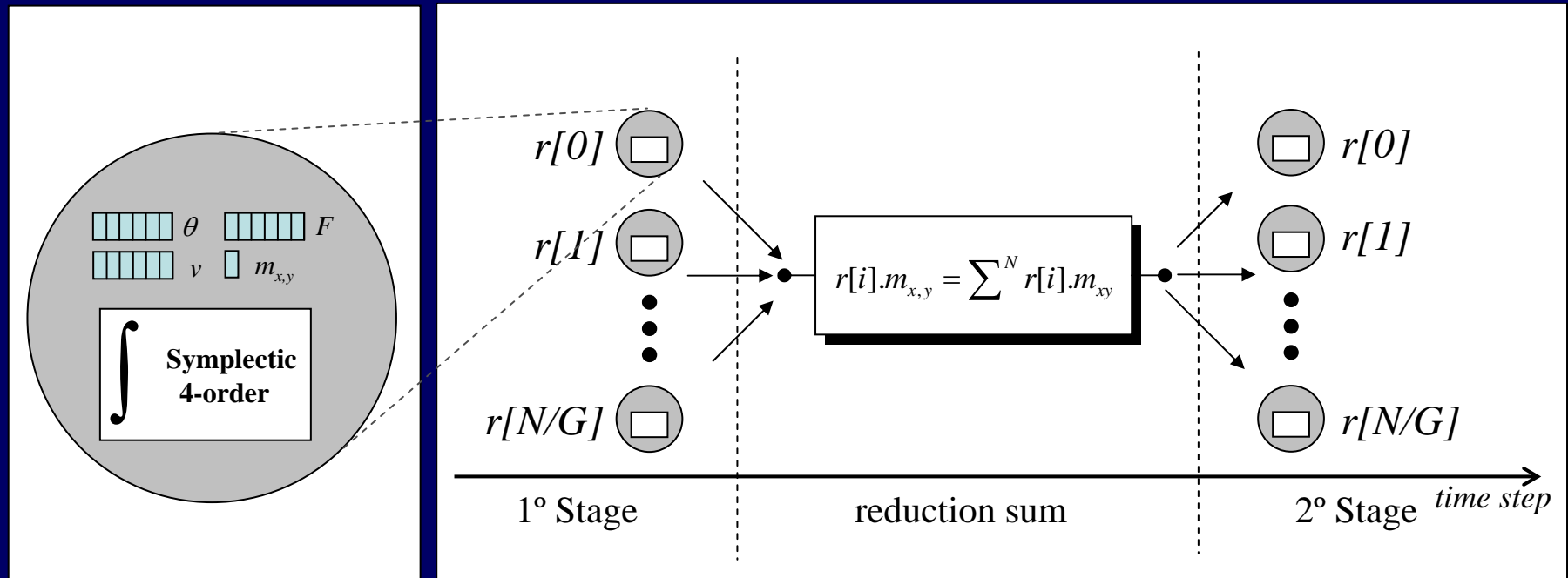


Objetivo final das simulações é provar que o principio zero da termodinâmica também funciona para sistemas em estados quase-estacionários

# Estratégia de Paralelização do NExtComp- $\pi$

## Classes de rotores são instanciadas como um “parallel array” Implementação do Integrador Simplético de Yoshida em Paralelo

- Integração em 2 etapas: 1) cálculo dos ângulos  $\theta$  e redução em  $m_{x,y}$ ;  
2) cálculo das forças e momentos



Programação por técnicas de orientação a objetos em linguagem Charm++.

- Solve the physical problem faster than its sequential version
- Deal with a larger physical system

# Suitable Features of Charm++

---

- **CHARM++ Prog. Language:** **PARALLEL PROGRAMMING LABORATORY**  
Department of Computer Science, University of Illinois at Urbana Champaign
- **C++ objects that communicate with each other efficiently**
- **Is target to tightly coupled and high-performance parallel machines**
- **Allow the scalability up to thousands of processors**
  - NAMD project for Biomolecular Simulations  
“*Scalable Molecular Dynamics with NAMD*” - Phillips et al. J.of Computational Chemistry- 2005
- **Use of object array (chare arrays) distributed over all processors**
  - Global identifier
- **When an object is waiting for some incoming data other ready objects are free to execute.**
- **Communication by remotely invoking methods on other objects by messages**
- **Performance Prediction on Large Machines**
  - Develop a parallel application for a non-existent machine
  - Performance tuning without continuous access to a large machine

# Estratégia de Paralelização do NExtComp- $\pi$

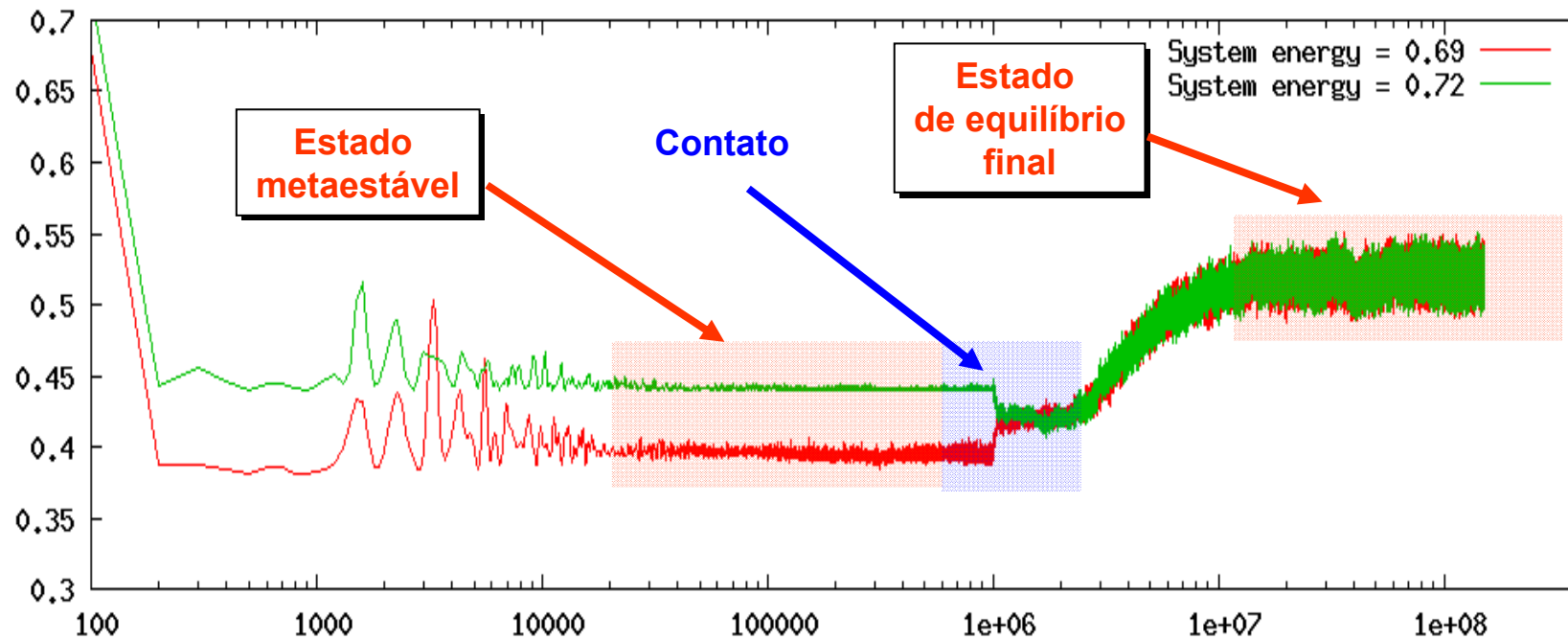
Tempos de Execução (100.000.000 timesteps)			
N	Cluster SSolar (CBPF) Paralelo (6 proc.)	Cluster CESUP/UFRGS (20 proc.)	Cluster Linux NCSA Paralelo (500 proc.)
100.000	≈ 140 dias	≈ 32 dias	≈ 14 horas (*)
500.000	≈ 2,5 anos	≈ 0,6 anos	≈ 84 horas (*)

**Programa paralelo otimizado para uma eficiência mínima de CPU ≈ 90%**

**(\*) – Tempo estimado, pois o Projeto no NCSA permitia 20 horas com 1000 processadores.**

# NNextComp- $\pi$ : Resultados Parciais

## NNextComp- $\pi$ : Resultados Parciais



**Cluster Linux – CESUP/UFRGS – 20 processadores (100.000 rotores).**

M. P. Albuquerque et al - "*NextComp - Molecular Dynamics Application for Long-Range Interacting Systems on a Computational Grid Environment*"; Workshop on Grid Applications, SBRC/2006

# Performance Analysis

*Projections* Timeline Tool analyzing tracedata from NextComp-MD- $\pi$ .

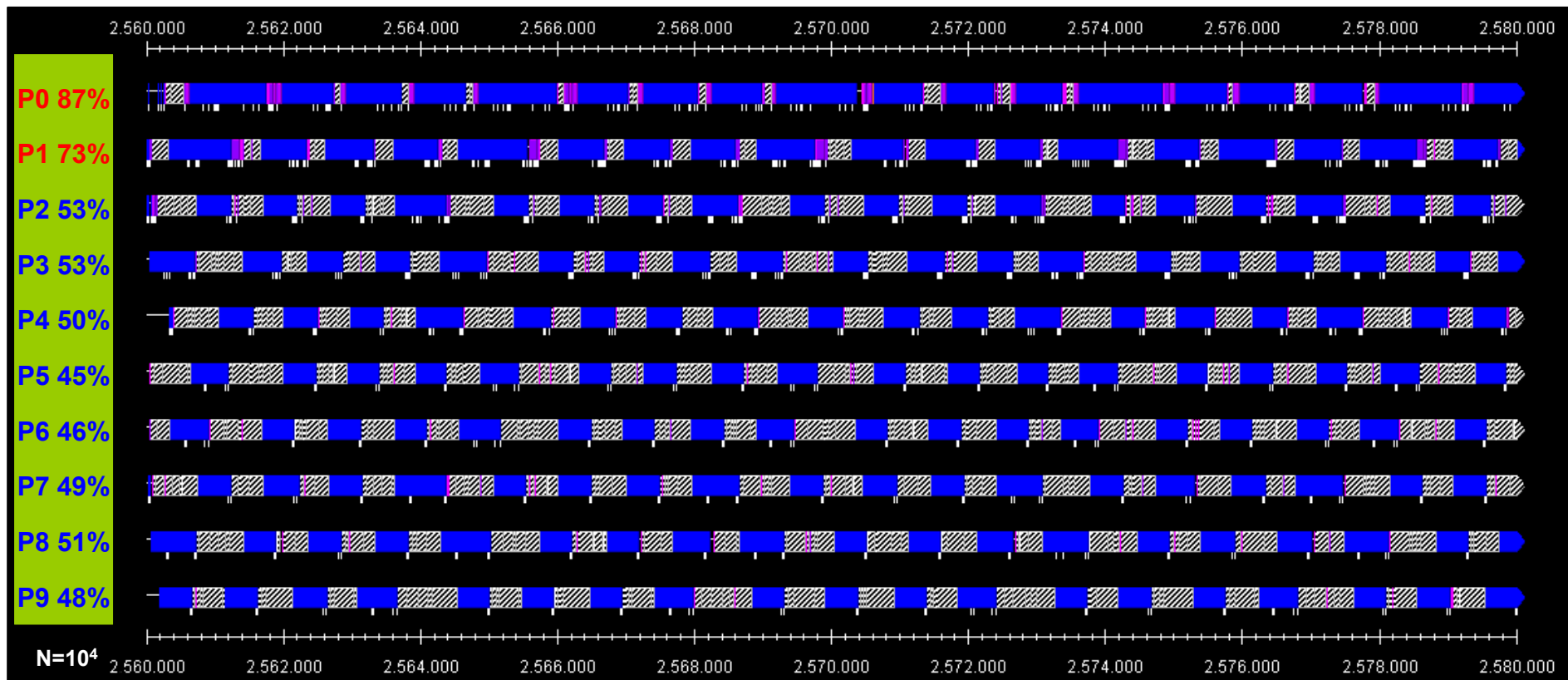


Figure: Tracedata window of  $\Delta t=20\text{ms}$  for NextComp-MD- $\pi$  running on NCSA Xeon Linux Cluster

## Parallel tasks have sections of idle time

- Frequent periods of communication because of the fourth-order integrator



# Decreasing the Idle Time

Estimation of physical parameters needs several realizations of the simulation

- Presence of the independent tasks for each simulation

Charm++ enhance task distribution and reduce the processors idle time

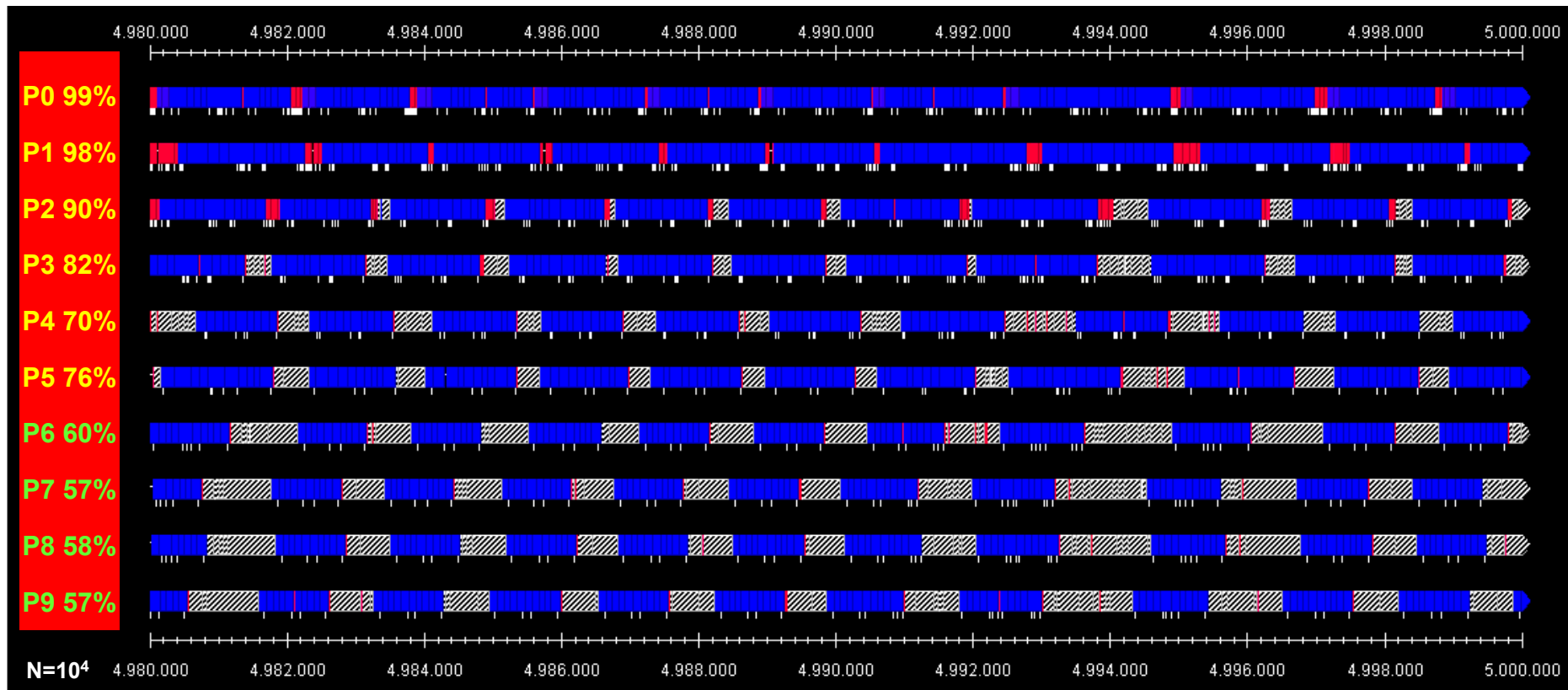


Figure: Tracedata window of  $\Delta t=20\text{ms}$  for 5 instances of the NextComp-MD- $\pi$  running on NCSA Xeon Linux Cluster

# Caracterização do Impacto em Publicações

- “q-exponential describes the distribution of scientific citations”

$$N(x) \propto 1/[1 + (q - 1) c/T]^{1/q-1}$$

**T – Temperatura efetiva**

- Software de coleta das informações:
  - Download automático a partir do portal ISI Web.
  - Processamento de 10 em 10 anos
  - Dados de Número de Citações.
  - Informações por país (campo “Address”)

## Bases:

Science Citation Index Expanded (1945-present)  
Social Sciences Citation Index (1956—present) e  
Arts and humanities Citation Index (1975—present)

The screenshot shows the ISI Web of Knowledge search results page. The search criteria are 'Address=(brazil) AND Year Published=(1980-1989)'. The results show 31,603 items. The first four results are:

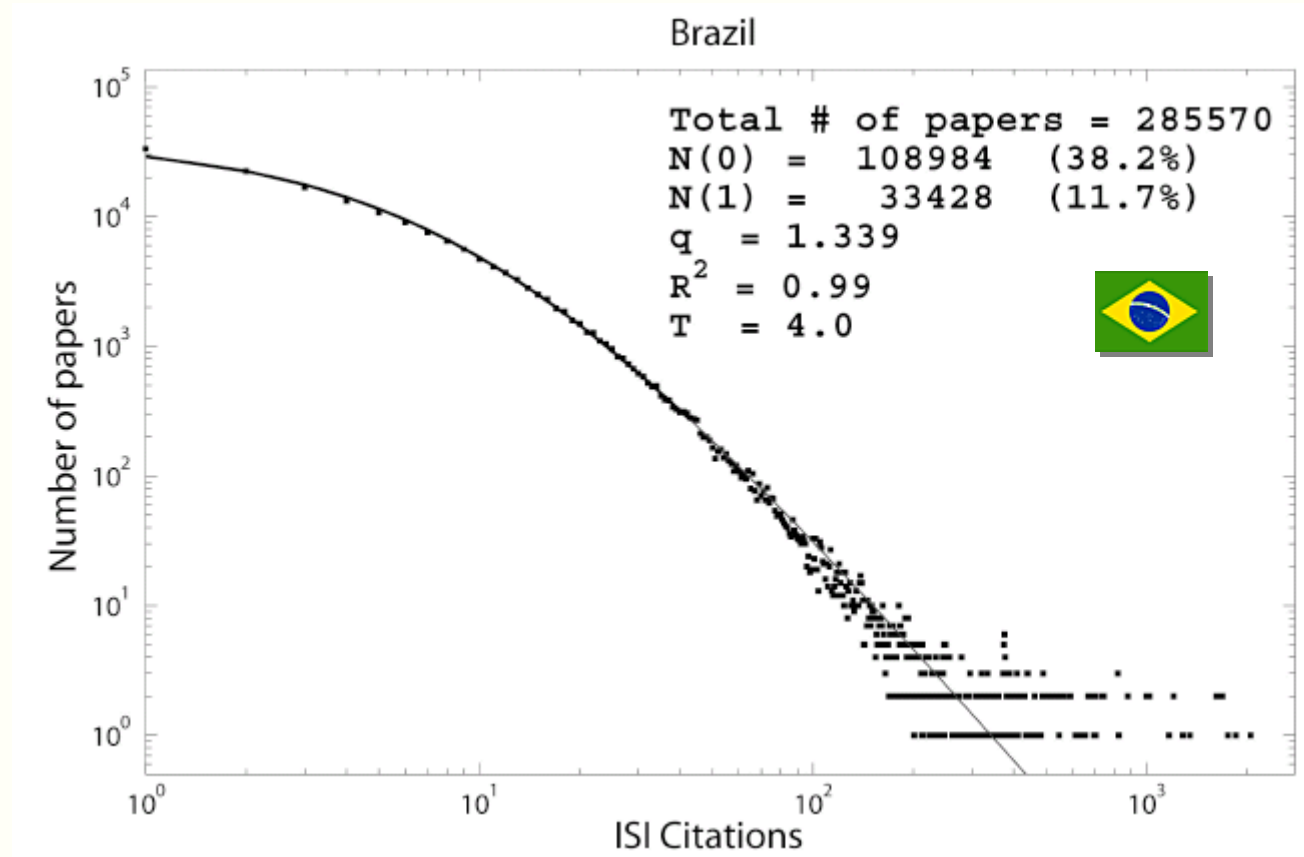
- Title: POSSIBLE GENERALIZATION OF BOLTZMANN-GIBBS STATISTICS  
Author(s): TSALLIS, C  
Source: JOURNAL OF STATISTICAL PHYSICS Volume: 52 Issue: 1-2 Pages: 479-487 Published: JUL 1988  
Times Cited: 2,157
- Title: QUANTUM TUNNELLING IN A DISSIPATIVE SYSTEM  
Author(s): CALDEIRA, AO, LEGGETT, AJ  
Source: ANNALS OF PHYSICS Volume: 149 Issue: 2 Pages: 374-456 Published: 1983  
Times Cited: 2,153
- Title: PATH INTEGRAL APPROACH TO QUANTUM BROWNIAN-MOTION  
Author(s): CALDEIRA, AO, LEGGETT, AJ  
Source: PHYSICA A Volume: 121 Issue: 3 Pages: 587-616 Published: 1983  
Times Cited: 1,250
- Title: ENZYME-LINKED IMMUNOELECTROTRANSFER BLOT TECHNIQUES (EITE) FOR STUDYING THE SPECIFICITIES OF ANTIGENS AND ANTIBODIES SEPARATED BY GEELECTROPHORESIS  
Author(s): TSANG, VCW; PERALTA, JM; SIMONS, AR  
Source: METHODS IN ENZYMOLOGY Volume: 92 Pages: 377-391 Part E Published: 1983  
Times Cited: 711

3.399.572 artigos para :



# Caracterização do Impacto em Publicações

- “q-exponential describes the distribution of scientific citations”

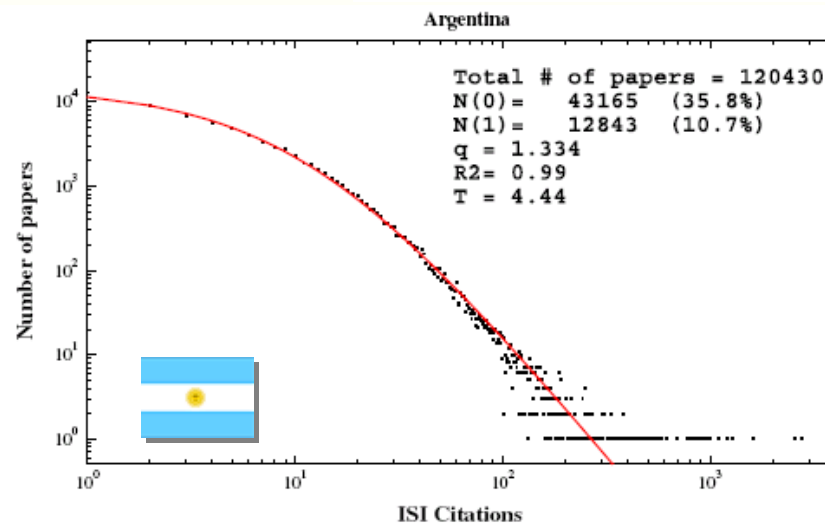
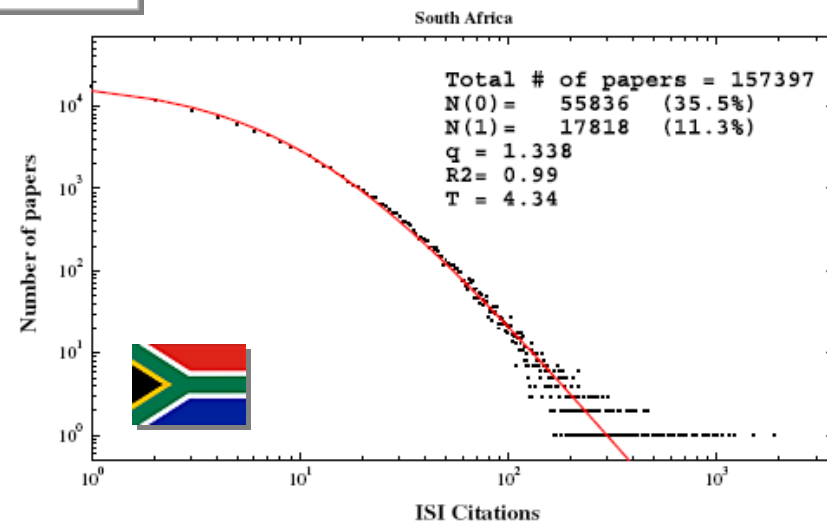
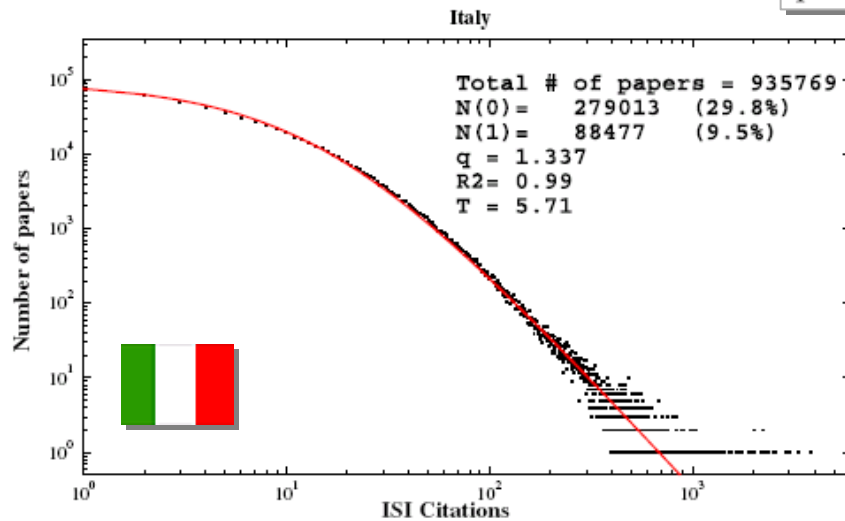


$$N(x) \propto 1/[1 + (q - 1) c/T]^{1/(q-1)}$$

# Caracterização do Impacto em Publicações

- “q-exponential describes the distribution of scientific citations”

$$q = 1.34 \pm 0.10.$$



# Caracterização do Impacto em Publicações

**Table 2** Best fitting values of  $q$  and effective temperature  $T$

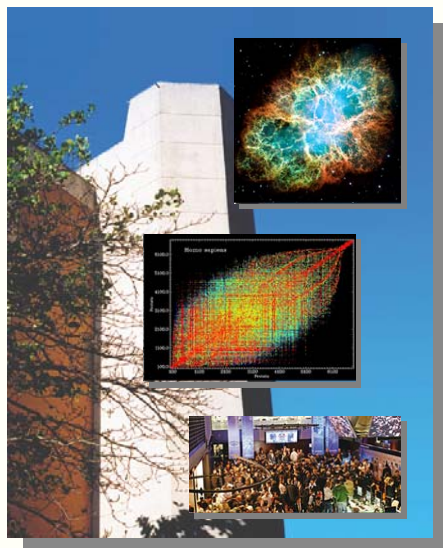
Country	Entropic index $q$	Linear regression coefficient $R^2$	Temperature $T$
Switzerland	1.350	0.97	7.14
Italy	1.337	0.99	5.82
Spain	1.325	0.99	5.20
Austria	1.400	0.99	4.87
Portugal	1.336	0.99	4.65
Argentina	1.334	0.99	4.44
Greece	1.330	0.99	4.41
Hungary	1.339	0.99	4.40
Chile	1.350	0.98	4.35
South Africa	1.338	0.99	4.25
Brazil	1.343	0.99	3.97
Mexico	1.335	0.99	3.28
Romania	1.345	0.99	2.94
Latinamerican countries (4)	1.330	0.99	4.08
European countries (8)	1.334	0.99	5.88
All countries (13)	1.340	0.99	5.26

Note that tested countries are ranked according to  $T$

- “*Tsallis  $q$ -exponential describes the distribution of scientific citations—a new characterization of the impact*”; Aristoklis D. A. et al Scientometrics (2009)
- “*A characterization of the scientific impact of Brazilian institutions*”; Aristoklis D. A. et al; Brazilian Journal of Physics (2009)

# INCT - Sistemas Complexos

2ª Reunião anual do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia



## Aplicações Tecnológicas da Mecânica Estatística Não-Extensiva

*Márcio P. de Albuquerque*  
*Marcelo P. de Albuquerque*

# Obrigado !

Grupo de Computação do CBPF

{mpa, marcelo@cbpf.br}

