

ISSN 2594-8997  
Vol. 3, Nº 11  
Novembro de 2020



# LNCC

*otícias*

# 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/MCTI).

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 Gadelha

**Diretor substituto:** Wagner Léo

**Coordenação de Gestão e Administração – COGEA:** Sérgio Figueiredo

**Programação web:** Coordenação de Tecnologia da Informação e Comunicação – COTIC / Serviço de Suporte de Sistemas e Redes

**Criação:** Matheus B. de Mendonça

**Redação e Diagramação:** Equipe ARCOS / Área de Comunicação Social  
Lígia Morais – Responsável  
Tathiana Tapajóz  
Graziele Soares

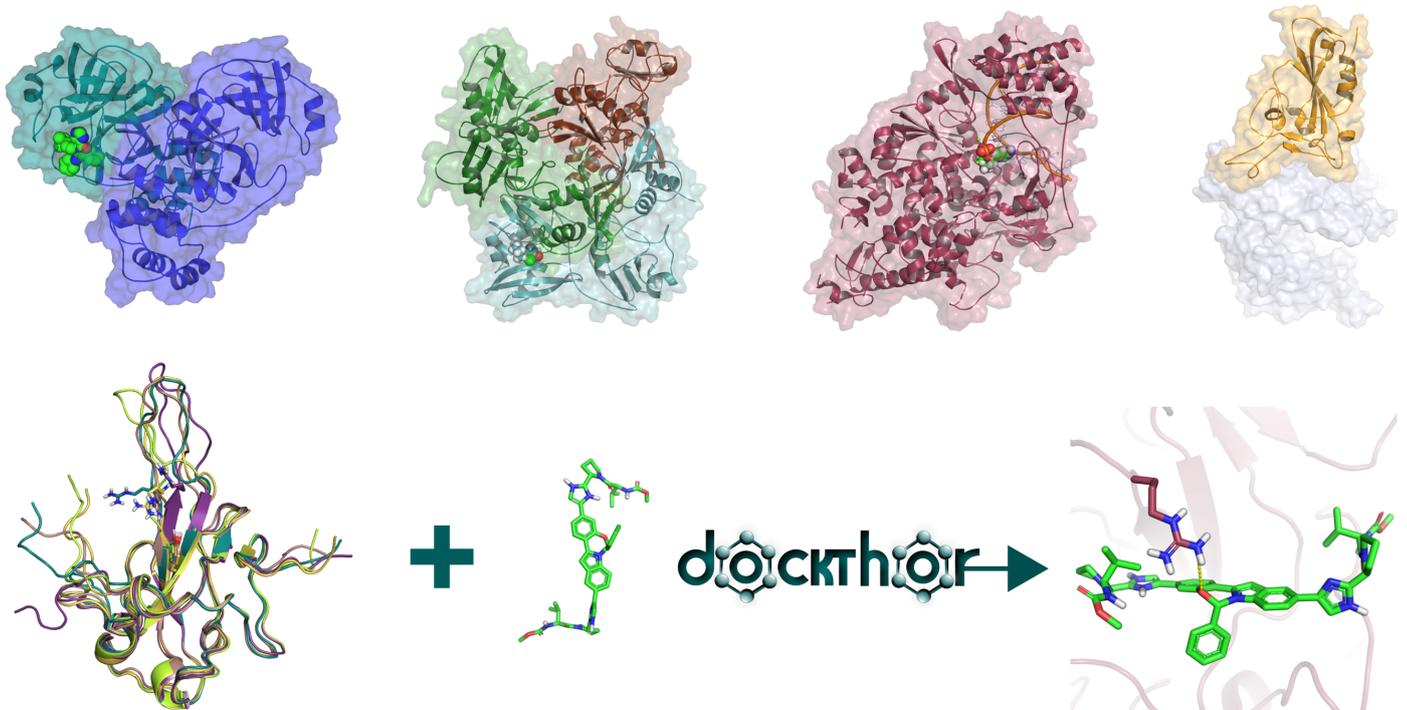
**ISSN:** 2594-8997

**Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC**

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

Contatos: Tel.: +55 (24) 2233 6101 / 2233-6203 | E-mail: [arcos@lncc.br](mailto:arcos@lncc.br)

Pesquisadores do LNCC tem pré-print publicado do artigo do Portal DockThor-VS com os alvos de SARS-CoV-2 e os estudos de reposicionamento de fármacos



O trabalho de pesquisa intitulado “Drug Design and Repurposing with DockThor-VS Web Server: Virtual Screening focusing on SARS-CoV-2 Therapeutic Targets and their Non-Synonym Variants” teve pré-print publicado e já se encontra submetido para revista indexada internacional. O trabalho apresenta os desenvolvimentos implementados no servidor web DockThor-VS para fornecer uma plataforma de triagem virtual (VS) com estruturas curadas de potenciais alvos terapêuticos do SARS-CoV-2 incorporando informações genéticas sobre variações não sinônimas relevantes.

O servidor web facilita a realização de experimentos de triagem virtual objetivando estudos de reposicionamento de fármacos através da disponibilização de uma biblioteca contendo os medicamentos, aprovados pelo Food and Drug Administration (FDA), disponíveis no mercado. Atualmente, o DockThor-VS fornece estruturas 3D prontas para triagem virtual para seis alvos terapêuticos de SARS-CoV-2: Nsp3 (PLpro), Nsp5 (Mpro, 3CLpro), Nsp12 (RdRp), Nsp15 (NendoU), proteína N e proteína Spike. São disponibilizadas no portal as estruturas 3D para a sequência genômica selvagem e para as variantes genômicas não sinônimas mais relevantes (fruto de um estudo envolvendo mais de 40 mil genomas de SARS-CoV-2). No total são disponibilizadas 45 estruturas 3D.

No trabalho são discutidos os resultados da triagem virtual envolvendo a biblioteca para reposicionamento de fármacos contra os seis alvos terapêuticos.

O trabalho foi coordenado pelo professor e pesquisador do LNCC, Laurent Dardenne em colaboração com a professora Marisa Nicolás (LNCC-Labinfo). O trabalho envolveu as pós-docs Isabella A. Guedes e Karina B.

dos Santos, os alunos da pós-graduação Leon S. C. Costa e Ana L. M. Karl, os pesquisadores do LNCC Fábio L. Custódio e Helio J. C. Barbosa, e os tecnologistas do SINAPAD Iury M. Teixeira, Marcelo M. Galheigo e Vivian Medeiros. Também participaram da pesquisa ex-alunos do LNCC, Eduardo Krempser e Gregório Kappaun, atualmente pesquisadores da Fundação Oswaldo Cruz e do Instituto Federal Fluminense – IFF (Campus Macaé), respectivamente.

O pré-print do artigo pode ser acessado em <https://www.researchsquare.com/article/rs-96789/v1>. A plataforma DockThor-VS está disponível de forma gratuita para pesquisadores de todo o mundo. Os usuários não cadastrados podem realizar experimentos com até 200 moléculas por vez, enquanto que estudos mais complexos envolvendo até 5000 moléculas estão liberados para usuários com projetos submetidos e aprovados.

A plataforma está totalmente operacional, tendo sido submetidos durante o ano de 2020 mais de dez mil experimentos de triagem virtual. O DockThor-VS está disponível gratuitamente em [www.dockthor.lncc.br](http://www.dockthor.lncc.br).

### Pesquisadores do LNCC publicam na revista Communications of the ACM

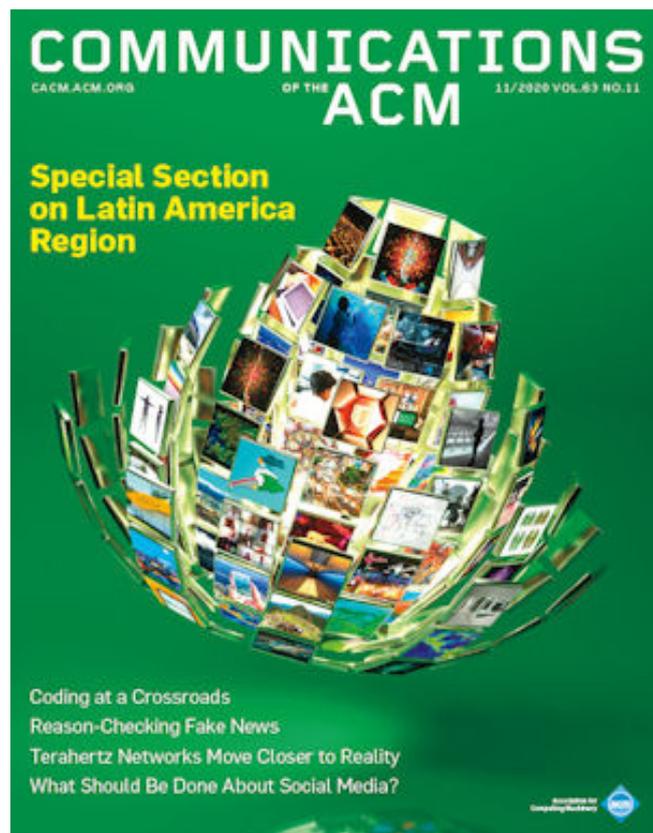
A revista Communications of the ACM (CACM) é a revista carro-chefe da Association for Computing Machinery, principal sociedade científica internacional da área de Computação. Cobrindo desde 1958 as últimas descobertas, inovações e pesquisas que inspiram e influenciam a área de Computação, a CACM traz aos leitores histórias detalhadas de tópicos emergentes, novas tendências em TI e aplicações de pesquisa prática.

A edição de novembro de 2020 apresenta uma seção especial sobre Computação na América Latina, e conta com dois artigos publicados por pesquisadores do LNCC.

O artigo "Digital Healthcare in Latin America: The Case of Brazil and Mexico" de autoria de Monica Tentori (CICESE, México), Artur Ziviani (LNCC, Brasil), Débora C. Muchaluat-Saade (UFF, Brasil), Jesus Favela (CICESE, México) traz uma discussão sobre iniciativas recentes na área de saúde digital na América Latina que ajudam a enfrentar desafios dos sistemas de saúde da região tendo como foco Brasil e México.

Link: <https://cacm.acm.org/magazines/2020/11/248215-digital-healthcare-in-latin-america/fulltext>

O artigo "The Latin American Supercomputing Ecosystem for Science" de autoria de Isidoro Gitler (CINESTAV, México), Antônio Tadeu A. Gomes (LNCC, Brasil) e Sérgio Nesmachnow (Universidad de la



República, Uruguai), apresenta as principais infraestruturas que compõem o ecossistema de supercomputação latino-americano, incluindo o supercomputador Santos Dumont do LNCC, além de citar projetos de pesquisa de impacto que utilizam essas infraestruturas e colaborações internacionais de países da região em temas relacionados a supercomputação.

Link: <https://cacm.acm.org/magazines/2020/11/248214-the-latin-american-supercomputing-ecosystem-for-science/fulltext>

## Professor do LNCC recebe prêmio de melhor artigo apresentado em evento da Sociedade Brasileira de Computação

O professor Fábio Borges é co-autor do artigo "Improving the Security of ChaCha against Differential Linear Cryptanalysis", que recebeu o prêmio de melhor artigo apresentado durante o evento Simpósio Brasileiro em Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (SBSeg). O artigo tem co-autoria de Muriilo Coutinho (ABIN), Iago Passos (UnB) e Rafael T. de Sousa Jr (UnB).

Além da premiação de melhor artigo, o professor do LNCC também recebeu menção honrosa na categoria Artigos Curtos pelo trabalho "Computação da Quadratura Gaussiana em um Esquema Criptográfico Parcialmente Homomórfico" com co-autoria de Paulo Ricardo Reis (LNCC) e Pedro Lara (CEFET-RJ).



## Estudante de Iniciação Científica do LNCC recebe menção honrosa no mais importante evento na área de Arquitetura de Computadores

O trabalho intitulado "Avaliação de Desenho de um Workflow Científico para Experimentos de RNA-Seq no Supercomputador Santos Dumont" recebeu menção honrosa durante o evento WSCAD-WIC Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho

<http://wscad.sbc.org.br/2020/programa-wic.html>.

O autor do trabalho é o bolsista PIBIC/LNCC Lucas Cruz e foi orientado pelos pesquisadores Carla Osthoff, Kary Ocana e Luiz Gadelha.

O programa PIBIC tem como finalidade despertar vocação científica e incentivar talentos potenciais entre estudantes de graduação universitária, mediante participação em projeto de pesquisa, orientados por pesquisadores qualificados. O Processo de seleção acontece sempre no período de Junho/Julho de cada ano.

Maiores informações em: <https://www.lncc.br/bolsasestudos>



## Seminários LNCC 40 anos, programação do ciclo de palestras virtuais no mês de novembro de 2020



NOVEMBRO  
14:00

# SEMINÁRIOS LNCC 40 ANOS



**09/11**  
**COLÓQUIO: Blending Physics-Based Models with Machine Learning in the Simulation of Complex Systems: Our Own Experience**  
Fernando Rochinha - Professor titular da COPPE/UFRJ, pesquisador 1A do CNPq e Membro do Conselho Técnico Científico do LNCC/MCTI

**23/11**  
**The Origin of the Multiscale Hybrid-Mixed Method: An Overview**  
Frédéric Valentin - LNCC/MCTI

**30/11**  
**Modelagem e análise de redes: uma trajetória pessoal rumo à interdisciplinaridade em três atos**  
Artur Ziviani - LNCC/MCTI

PARA MAIS INFORMAÇÕES ACESSE:  
[www.lncc.br](http://www.lncc.br)

Av. Getúlio Vargas 333, Quitandinha, Petrópolis, RJ  
eventos@lncc.br · (24) 2233.6101 · [www.lncc.br](http://www.lncc.br)



MINISTÉRIO DA  
CIÊNCIA, TECNOLOGIA  
E INOVAÇÕES



PÁTRIA AMADA  
BRASIL  
GOVERNO FEDERAL

**E**m continuidade ao ciclo de palestras "Seminários LNCC 40 anos", anunciamos as próximas apresentações do mês de novembro. Assim como nas edições anteriores, as palestras são gratuitas e abertas ao público em geral através de webinars do aplicativo Zoom (download disponível em <https://zoom.us/>), sendo também transmitidas ao vivo pelo canal do LNCC no YouTube.

Para se inscrever, acesse o link de cada palestra abaixo.

09/11 às 14h

(Colóquio) Blending Physics-Based Models with Machine Learning in the Simulation of Complex Systems: Our Own Experience, com Fernando Rochinha, professor titular da COPPE/UFRJ, pesquisador 1A do CNPq e Membro do Conselho Técnico Científico do LNCC/MCTI.

Link para inscrição: [https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN\\_LUC7HrNHR8GA\\_evsZ0XknA](https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_LUC7HrNHR8GA_evsZ0XknA)

23/11 às 14h

The Origin of the Multiscale Hybrid-Mixed Method: An Overview, com Frédéric Valentin, pesquisador do LNCC.

Link para inscrição: [https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN\\_laQziyx\\_QA-DfhFIT1hygA](https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_laQziyx_QA-DfhFIT1hygA)

30/11 às 14h

Modelagem e análise de redes: uma trajetória pessoal rumo à interdisciplinaridade em três atos, com Artur Ziviani, pesquisador do LNCC.

Link para inscrição: [https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN\\_iMYTac25RByWUHh4v0boLQ\\_](https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_iMYTac25RByWUHh4v0boLQ_)

Para mais informações, acesse o site do LNCC em [www.lncc.br](http://www.lncc.br).

## Pós-graduação do LNCC oferece Seminários da Série PROEX



# SÉRIE PROEX

**PESQUISAS DESENVOLVIDAS POR DISCENTES DO LNCC EM 2020**

**EVENTO ONLINE**  
16/NOV ÀS 14H

**1ª PALESTRA:**  
**Video Summarization Through Total Variation, Deep Semi-Supervised Autoencoder and Clustering Algorithms**  
ÉDEN PEREIRA

**2ª PALESTRA:**  
**Modelagem matemática da perda de antígeno na imunoterapia com células CAR T**  
EMANUELLE ARANTES PAIXÃO

**3ª PALESTRA:**  
**Optimal Linear Mean Square Filter for MJLS with Hidden Markov Chain**  
FORTIÀ VERGES

**4ª PALESTRA:**  
**HDG methods for linear elasticity on curved meshes**  
ISMAEL LEDOINO

PARA MAIS INFORMAÇÕES ACESSE: [www.lncc.br](http://www.lncc.br)

Av. Getúlio Vargas 333, Quitandinha, Petrópolis, RJ  
eventos@lncc.br · (24) 2233.6101 · [www.lncc.br](http://www.lncc.br)



Laboratório Nacional de Computação Científica

MINISTÉRIO DA CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÕES



PÁTRIA AMADA BRASIL  
GOVERNO FEDERAL

No dia 16 de novembro às 14h, o LNCC irá promover a Série de Seminários PROEX. O evento deste mês traz quatro palestras nas quais serão apresentadas pesquisas desenvolvidas por discentes do Programa de Pós-graduação do LNCC em 2020. São elas:

- Video Summarization Through Total Variation, Deep Semi-Supervised Autoencoder and Clustering Algorithms, com Éden Pereira.
- Modelagem matemática da perda de antígeno na imunoterapia com células CAR T, com Emanuelle Arantes Paixão.
- Optimal Linear Mean Square Filter for MJLS with Hidden Markov Chain, com Fortià Verges. HDG methods for linear elasticity on curved meshes, com Ismael Ledoino.

Link para inscrição: [https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN\\_t0cZriEwQmWwl-ysh1EbQg](https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_t0cZriEwQmWwl-ysh1EbQg).

Mais informações, acesse o link "Eventos" no site do LNCC.

## LNCC realiza Programa de Verão 2021

**D**e 11 de janeiro a 12 de fevereiro de 2021 o Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) realizará a 18ª edição do seu Programa de Verão. Este ano o evento acontecerá de forma remota e contará com a seguinte programação:

- Semana Supercomputador SDumont - (11 a 22 de janeiro de 2021)
- VII Encontro em Modelagem Matemática do Crescimento Tumoral (25 a 29 de janeiro de 2021)
- Jornada em Ciência de Dados (01 a 05 de fevereiro de 2021)
- XIV Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional - (08 a 10 de fevereiro de 2021)
- Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica - (11 de fevereiro de 2021)
- Minicursos Avulsos.
- Introdução à Computação Quântica - (25 a 28 de janeiro de 2021)
- Difusões Estocásticas com Computação: Aplicações, Métodos Numéricos e Controle Ótimo (28 de janeiro de 2021)
- Fundamentos da Teoria de Aprendizado de Máquina (28 a 29 de janeiro de 2021)
- Organização e Informação (Biológicas) (01 a 05 de fevereiro de 2021)
- Integrando Redes Neurais, Modelos Físicos e Rendering para Animação de Fluidos (02 a 05 de fevereiro de 2021)

As inscrições nas atividades do Programa de Verão 2021 serão gratuitas e vão acontecer no período de 01 de dezembro de 2020 a 15 de janeiro de 2021.

Informações detalhadas sobre a programação estão disponíveis na nova página do PV2021 :

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



- Escola Supercomputador SDumont
- Jornada em Ciência de Dados
- Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica
- XIV Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional
- VII Encontro em Modelagem Matemática do Crescimento Tumoral
- Minicursos Avulsos

#### COMITÊ ORGANIZADOR:

##### COORDENADORES

Abimael F.D. Loula  
Sandra M. C. Malta

Fabio Lima Custódio  
Carla Osthoff Barros  
Marcos Garcia Todorov  
Fabio A. Machado Porto

#### CONTATO:

✉ [verao@lncc.br](mailto:verao@lncc.br)

☎ (24) 2233-6150

📍 Av. Getúlio Vargas, 333, Quitandinha  
Petrópolis, RJ

Inscrições gratuitas:  
de 01/12/2020 a 15/01/2021

PARA MAIS INFORMAÇÕES ACESSE:

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



MINISTÉRIO DA  
CIÊNCIA, TECNOLOGIA  
E INOVAÇÕES



## LNCC participa de importante evento para debate de temas emergentes da computação

O Laboratório Nacional de Computação Científica terá trabalhos apresentados no XL Congresso da Sociedade Brasileira de Computação (CSBC 2020), edição do evento que será realizada online no período de 16 a 20 de novembro e terá como tema “Artificialmente humano ou Humanamente artificial? Desafios para a sociedade 5.0”. Um dos trabalhos serão apresentado no XIV Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2020) e foi desenvolvido no grupo ComCiDis/LNCC na sua linha de pesquisa em Green AI: Avaliação do Consumo de Energia e o Impacto da emissão de CO2 para algoritmos de Inteligência Artificial (Felipe Bernardo, Gabrieli Silva, Matheus Gritz, Mariza Ferro, Bruno Schulze).

Outro trabalho será apresentado no IX Brazilian Workshop on Social Network Analysis and Mining (BraSNAM 2020) e estuda o espalhamento de opiniões usando redes sociais e a sua influência sobre a adesão a comportamentos de distanciamento social em situação de pandemia. O trabalho intitulado Disconnecting for the good: A network-oriented model for social contagion of opinions and social network interventions to increase adherence to social distancing (Eric Araújo, Mariza Ferro, Gabrieli Silva) foi coordenado pela UFLA e desenvolvido em colaboração com a Dra. Mariza Ferro (LNCC).

Maiores informações sobre o evento, podem ser acessados em <http://www2.sbc.org.br/csbc2020/>

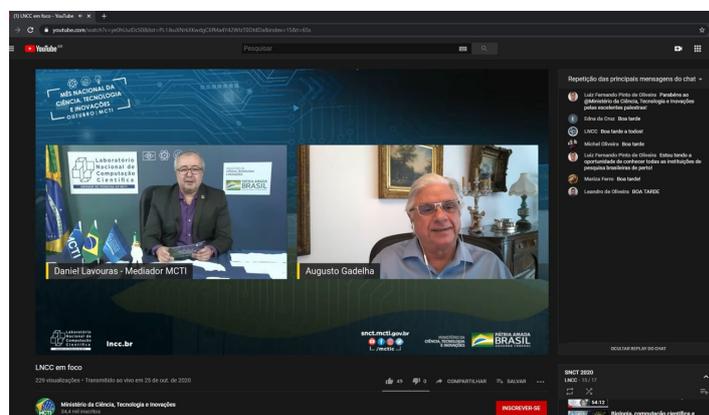
## LNCC participa da 17ª Semana Nacional de Ciência e Tecnologia

O Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) marcou presença na 17ª edição da Semana Nacional de Ciência e Tecnologia (SNCT) que ocorreu entre os dias 17 e 25 de outubro. A programação foi composta por palestras, debates e bate-papos com cientistas levando ao público de todas as idades, conteúdos sobre Inteligência Artificial.

Diferente dos anos anteriores, a SNCT 2020 teve que se adaptar às regras de distanciamento social impostas pela pandemia do Covid-19 e os encontros foram realizados no formato virtual, ampliando a possibilidade de contar com mais participantes pois as atividades estão disponíveis para acesso permanente, através do canal do LNCC no Youtube.

As atividades promovidas pelo LNCC na SNCT e no MNCTI estão disponíveis em:

<https://www.youtube.com/watch?v=aSqdf8-Qbl4&list=PL1JkuXNrkXKwdgC6fMa4Y42WizT0Dt4Da>



## Jornada de Iniciação Científica e Tecnológica no LNCC

O LNCC promoveu entre os dias 15 e 16 de outubro o fórum de divulgação das pesquisas desenvolvidas no contexto dos Programas Institucionais de Bolsas de Iniciação Científica (PIBIC) e de Bolsas de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológica (PIBITI) fomentados pelo CNPq.

Os trabalhos foram apresentados pelos bolsistas de forma virtual, durante os dois dias e foram avaliados pelo comitê científico externo composto pelos professores Carlos Cristiano Hasenclever Borges (UFJF) e Franklin Marquezino (UFRJ) na presença do coordenador do PIBIC, Marcos Garcia Todorov.

Após deliberação, o comitê externo selecionou como destaques os seguintes trabalhos, como igualmente excelentes:

- Método dos Volumes Finitos Aplicados para a Solução de Problemas de Mudança de Fase

Bolsista: Ophir Valiante Duarte Neto

Orientadores: Elson Toledo e Maicon William Niebus Odone

- Aplicação das Ferramentas Intel Parallel Studio para Modernização de Código para Métodos Numéricos de Diferenças Finitas para Solução de Equações Diferenciais Parciais em Arquitetura Intel Haswel/Broadwell

Bolsista: Gabriel Pinheiro da Costa

Orientadores: Carla Osthoff e Frederico Luis Cabral

- Uso de Aprendizado de Máquina para Melhorias no Desempenho e no Consumo de Energia em Sistemas HPC

Bolsista: Vitor Carlos Soares Sá

Orientadores: Bruno Schulze e Mariza Ferro

O comitê também concedeu menções honrosas aos seguintes bolsistas e orientadores, pelos excelentes trabalhos:

- Segmentação de Imagens Utilizando Algoritmos Bio-Inspirados e Redes Neurais com Aplicações para Imagens Médicas e Biológicas

Bolsista: Lucas Pampolin Laheras

Orientadores: Gilson Antonio Giraldi e Paulo Sérgio Silva Rodrigues

- Simulação de Fluidos Direcionados por Campos Tensoriais para Animação

Bolsista: Arthur Gonze Machado

Orientador: Gilson Giraldi Identificação de Lentes Gravitacionais Utilizando Técnicas de Aprendizagem Profunda

Bolsista: Viviane de Mattos Matioli

Orientador: Fábio Porto



# LNCC

otícias



Foto: Matheus B. de Mendonça

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