

ISSN 2594-8997
Vol. 3, Nº 9
Setembro 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

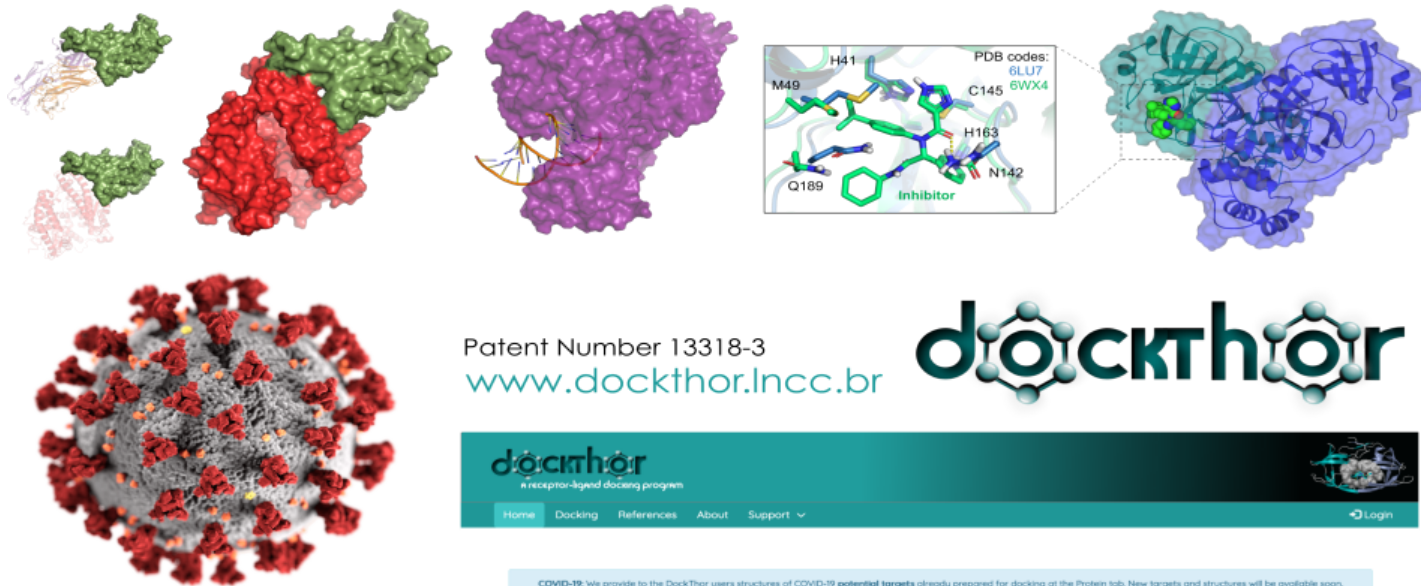
ISSN: 2594-8997

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

Portal web de triagem virtual para a busca de novos tratamentos da COVID-19 é disponibilizado por pesquisadores do LNCC à comunidade científica



SARS-CoV-2
Vírus da COVID-19

A plataforma computacional DockThor-VS (<https://www.dockthor.lncc.br>), utilizada amplamente para a pesquisa de novos medicamentos de forma virtual, foi desenvolvida em 2013 pelo Grupo de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos (GMMSB) do Laboratório Nacional de Computação Científica e está acoplada ao supercomputador Santos Dumont. Diante da pandemia da COVID-19, a plataforma foi incrementada para disponibilizar aos usuários estruturas tridimensionais de proteínas-alvo importantes para o desenvolvimento de novas moléculas e reposicionamento de fármacos para o tratamento da doença. Dentre os aspectos mais relevantes associados ao desenvolvimento desta plataforma, estão a disponibilização de diferentes "estados conformacionais" de cada proteína alvo, simulando sua flexibilidade em meio biológico; modelagem tridimensional de mutações relevantes destas proteínas que podem afetar a ação de possíveis fármacos e gerar resistência a medicamentos, identificadas a partir da análise de milhares de genomas de SARS-

Welcome to DockThor

A Free Web Server for Protein-Ligand Docking

CoV-2 sequenciados no mundo todo; e disponibilização de banco de estruturas tridimensionais dos fármacos já aprovados pelo Food and Drug Administration (FDA) para estudos de reposicionamento de fármacos. A estratégia de reposicionamento de fármacos tem sido amplamente utilizada em todo o mundo e tem como objetivo identificar fármacos utilizados atualmente para o tratamento de outras doenças que poderiam atuar também no tratamento da COVID-19.

O desenvolvimento do DockThor-VS direcionado para alvos terapêuticos do vírus SARS-CoV-2 foi coordenado pelo prof. Laurent Dardenne (LNCC) em colaboração com a Profa. Marisa Nicolás (LNCC), a qual coordenou os estudos genômicos dos alvos terapêuticos. O desenvolvimento da plataforma, incluindo as técnicas de inteligência computacional para triagem virtual, foi inteiramente realizado por pesquisadores do LNCC, incluindo a pesquisadora de pós-doutorado PCI/MCTI Isabella Guedes, alunos e ex-alunos da Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC.

"A combinação e disponibilização de informações estruturais sobre os alvos terapêuticos, técnicas computacionais avançadas para o planejamento de fármacos e recursos computacionais de alto desempenho podem direcionar e acelerar as pesquisas de diversos grupos brasileiros e internacionais na procura por um tratamento para COVID-19 - destaca Laurent Dardenne. "Disponibilizar para a comunidade científica as variantes genômicas das proteínas do vírus que são alvos terapêuticos é muito importante para desenvolver medicamentos, vacinas e testes diagnósticos mais eficazes, contornando problemas como resistência a fármacos antivirais" - ressalta Marisa Nicolás.

Um artigo científico será submetido em breve para revista indexada internacional contendo os detalhes de implementação da plataforma DockThor-VS e os resultados de estudos computacio-

nais de reposicionamento de fármacos para todas as proteínas alvo do SARS-CoV-2 disponibilizadas. Atualmente, o portal possui 35 estruturas tridimensionais relacionadas a seis diferentes proteínas-alvo do SARS-CoV-2.

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 nos primeiros quinze dias de agosto cerca de 1200 experimentos de triagem virtual. O trabalho foi realizado com financiamento das agências de fomento à pesquisa FAPERJ, CAPES e CNPq.

LNCC oferece curso de matemática preparatório para a Pós-graduação em Modelagem Computacional do LNCC



INTRODUÇÃO AO CÁLCULO PROFESSOR: PAULO CÉSAR MARQUES VIEIRA

CARGA HORÁRIA: 36H
PERÍODO: 21/09 A 11/12/2020
HORÁRIO DAS AULAS: 4ª E 6ª DE 13:30 ÀS 15:00
MATRÍCULAS: 14 A 17/09/2020
SOLICITAÇÃO DE FORMULÁRIO E ENVIO DA INSCRIÇÃO
SOMENTE PELO E-MAIL: COPGA@LNCC.BR

informações/inscrições:
Secretaria de pós-graduação
e-mail: copga@lncc.br



MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÕES



O Programa de Pós-graduação do LNCC oferece o curso "Introdução ao cálculo", ministrado pelo professor Paulo César Marques Vieira. O curso será virtual, é gratuito e aberto ao público.

Público alvo: Interessados no curso de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC, que precisem de reforço em cálculo, e alunos matriculados no Programa.

Ementa: Funções; Limites de Funções; Continuidade; Derivadas; Integrais; Sequências e Séries; Funções Vetoriais; Derivadas Parciais e Equações Diferenciais Ordinárias Lineares de Segunda Ordem.

As matrículas estarão abertas 14 a 17 de setembro de 2020. Para mais informações entrar em contato com: copga@lncc.br.

Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC - Segunda seleção para Mestrado e Doutorado

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO DO LNCC



MESTRADO & DOUTORADO

MODELAGEM COMPUTACIONAL 2020

SEGUNDA SELEÇÃO 2020:

Inscrições: 14/09/2020 a 23/10/2020

Matrículas em Janeiro e Março de 2021

Informações e Inscrição:

<http://www.posgrad.lncc.br>

E-mail: copga@lncc.br

Av. Getúlio Vargas 333, Quitandinha • Petrópolis, RJ • Tel.: 24 2233-6024



Entre 14 de setembro e 23 de outubro de 2020 estarão abertas as inscrições para o programa de Pós-Graduação Multidisciplinar de Mestrado e Doutorado em Modelagem Computacional do LNCC. O processo de seleção habilitará para matrícula em janeiro ou março de 2021.

Pioneiro no Brasil em Modelagem Computacional, o programa existe desde 2000 e possui conceito 6 na CAPES, sendo 7 a nota máxima possível. O programa tem por pilares áreas como Matemática Aplicada, Ciência da Computação e Modelagem,

possuindo cinco linhas de pesquisa:

- Modelagem Matemática e Computacional de Circulação e Transporte;
- Modelagem Matemática e Computacional de Equilíbrio e Otimização;
- Modelagem Matemática e Computacional de Biosistemas e Bioinformática;
- Controle e Filtragem de Sistemas Dinâmicos;
- Computação Científica.

Mais informações e inscrições:

<http://www.posgrad.lncc.br>

Seminários LNCC 40 anos, programação do ciclo de palestras virtuais no mês de setembro



SETEMBRO
14:00

SEMINÁRIOS LNCC 40 ANOS



21/09

Ambientes Virtuais e Multimídia Aplicada
Jauvane de Oliveira - LNCC/MCTI

28/09

Problems of (Organised) Complexity and Complexity of Problems
Maurício Kritz - LNCC/MCTI

PARA MAIS INFORMAÇÕES ACESSE: www.lncc.br

Av. Getúlio Vargas 333, Quitandinha, Petrópolis, RJ
eventos@lncc.br · (24) 2233.6101 · www.lncc.br



Laboratório
Nacional de
Computação
Científica
UNIDADE DE PESQUISA DO MCTI

MINISTÉRIO DA
CIÊNCIA, TECNOLOGIA
E INOVAÇÕES



PÁTRIA AMADA
BRASIL
GOVERNO FEDERAL

Dando continuidade ao ciclo de palestras "Seminários LNCC 40 anos", anunciamos as próximas apresentações do mês de setembro. 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 listada abaixo.

21/09 às 14:00

Ambientes Virtuais e Multimídia Aplicada, com Jauvane de Oliveira, pesquisador do LNCC.

Link para inscrição:

https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_Lk_hfQ9v8SpOIH4_PrHTNfw

28/09 às 14:00

Problems of (Organised) Complexity and Complexity of Problems, com Maurício Kritz, pesquisador do LNCC.

Link para inscrição:

https://us02web.zoom.us/webinar/register/WN_Cr_ujxB-qR3aRrlax_Et3rQ

Para mais informações, acesse o site do LNCC em: www.lncc.br.

LNCC participa da Conferência de Computação de Alto Desempenho da América Latina - CARLA 2020 Cuenca Virtual

O diretor do LNCC, Dr. Augusto Gadelha Vieira, será um dos apresentadores do painel “O papel da computação avançada na América Latina: fortalecendo as capacidades de pesquisa das Redes Nacionais de Pesquisa e Educação”.

O painel visa criar um espaço de discussão sobre experiências, necessidades e expectativas para o fortalecimento de ecossistemas de computação avançados, através desenvolvimento de comunidades e sistemas nacionais de supercomputação, levando em consideração as particularidades de cada um dos países convidados e expectativas no meio ambiente continental, sem esquecer a visibilidade e interação a nível global.

O evento será realizado no dia 04 de setembro às 16h e poderá ser acessado gratuitamente nos links abaixo:

Youtube:

<https://youtu.be/FSA9Pd-fixc>

Facebook:

<https://www.facebook.com/watch/?v=319676202620757&extid=HNMvr4JazVENZORG>

Zoom:

<https://cedia.zoom.us/j/93932645444>

Sobre o painel:

As Redes Nacionais de Pesquisa em Educação (NRENS) desempenham um papel fundamental no desenvolvimento de recursos avançados de computação em diferentes países. Seu apoio não é limitado de interconexão e acesso; se estende ao fortalecimento de recursos e apoio político e econômico a iniciativas destinadas a apoiar os esforços de pes-

quisa de suas universidades membros. O objetivo dessas capacidades é produzir um maior impacto social, através da participação de atores de ecossistemas de pesquisa e desenvolvimento, tanto em atividades de pesquisa, treinamento e divulgação, como em desenvolvimento de conhecimentos científicos, acadêmicos e inovação para diferentes grupos de interesse: pesquisadores, estudantes, sociedade, indústria, instituições governamentais, principalmente aquelas diretamente envolvidas com a comunidade acadêmica.

No âmbito continental, RedCLARA tem dado seu firme apoio à criação da Computação Avançada para América Latina e Caribe, SCALAC, que hoje em aliança estratégica de pesquisadores e centros relacionados à computação de alto desempenho. Sua missão é contribuir para o fortalecimento do sistema de forma integral: suas capacidades tecnológicas, seu conhecimento e sustentabilidade, bem como o impacto social derivado. Experiências diferentes em outras regiões do mundo, como PRACE (aliança estratégica GÉANT), Compute Canada (que conta com o apoio da rede CANARIE) e de alguns países da América Latina, como o SINAPAD (Brasil), RedMexSu (México) e LaRedCCA (Colômbia), demonstram a importância de relação simbiótica que deve existir entre os atores de ecossistemas de computação avançados no continente e servir de exemplo para levar a discussão sobre essas questões a cada um dos países da América Latina e do Caribe.

Saiba mais sobre o evento em:

<https://carla2020.org/>



Incubadora de Empresas do LNCC recebe novo projeto inovador

O empreendedor Caio Rocha, sócio da empresa Quipo Tech é o mais novo empresário participante do programa de incubação da Incubadora LNCC. A empresa possui alto grau de inovação de produto/serviço a ser ofertado ao mercado e potencial de interação com as atividades de pesquisa do LNCC.

A Quipo Tech é uma startup que surgiu com o objetivo de desenvolver tecnologias emergentes, aplicando soluções baseadas em Blockchain para rastreabilidade de cadeias produtivas, protocolos de confiança, segurança, certificação e validação de transações com contratos inteligentes. A nova residente da Incubadora LNCC, associando inteligência, criatividade e inovação, acredita na utilização de novas tecnologias para criação de soluções, tanto para empresas quanto para pessoas, que contribuam para a construção de um futuro melhor, com mais transparência e segurança nas relações.

Há mais de 14 anos a Incubadora de Empresas do LNCC apoia o desenvolvimento de negócios inovadores de base tecnológica. Em um ambiente propício à atividade empreendedora, as empresas incubadas contam com benefícios como consultorias gerenciais, treinamento, espaço físico, serviços de comunicação e apoio para captação de recursos. Para mais informações sobre o programa da Incubadora LNCC, entre em contato pelo e-mail incubadora@lncc.br.



Pesquisadora do LNCC participa de Webinar sobre Mercado de IA nos EUA

No dia 3 de agosto, a pesquisadora do Laboratório Nacional de Computação Científica, Mariza Ferro, foi a convidada especial do webinar "Oportunidades no Mercado de Inteligência Artificial nos EUA". Mariza é especialista em Inteligência Artificial do LNCC desenvolvendo pesquisas nessa área, principalmente em GreenAI, e também presta consultoria para empresas que querem desenvolver projetos na área de IA.

O evento organizado pela Agência Brasileira de Promoção de Exportações e Investimentos - Apex-Brasil, teve como objetivo apresentar às empresas brasileiras o mercado de tecnologia no país norte-americano. Os especialistas apresentaram os principais dados do estudo "Estados Unidos da América - Inteligência Artificial 2020", lançado em abril deste ano.

O webinar foi direcionado para as empresas brasileiras da área de tecnologia com interesse em

atuar no mercado norte-americano e ofereceu informações relevantes sobre como explorar oportunidades nos EUA. Mariza falou sobre possíveis impulsionadores e obstáculos a serem considerados pelas empresas que querem trabalhar com Inteligência Artificial e sobre a importância da governança de dados.



LNCC apresenta o Supercomputador Santos Dumont na XI Escola Regional de Alto Desempenho de São Paulo

A pesquisadora Carla Osthoff representou o Laboratório Nacional de Computação Científica na XI Escola Regional de Alto Desempenho de São Paulo (ERAD/SP 2020) e ministrou a palestra "A arquitetura do Supercomputador Santos Dumont e os desafios da pesquisa brasileira na área de computação de alto desempenho". O evento que acontece anualmente é promovido pela Comissão Especial de Arquitetura de Computadores e Processamento de Alto Desempenho (CE-ACPAD) da Sociedade Brasileira de Computação e pela Comissão Regional de Computação de Alto Desempenho do Estado de São Paulo (CRAD-SP).

A programação completa pode ser conferida através do website:

<https://eradsp2020.ncc.unesp.br/>



LNCC participa da 4ª edição da Escola de Inverno do Instituto de Computação da UFF

Os pesquisadores do LNCC Arthur Ziviani e Fábio Porto representaram o Laboratório Nacional de Computação Científica na EINV-PPGC/UFF 2020, evento organizado pelo Instituto de Computação da UFF.

Arthur Ziviani participou do Painel "Excelência em Pesquisa em Computação". Neste painel, os coordenadores de pós-graduação Artur Ziviani (LNCC), Célio Albuquerque (UFF) e Luciana Buriol (UFRGS) conversaram e compartilharam a visão de excelência em pesquisa em computação na pós-graduação brasileira, quais ações seus programas executam e quais são os desafios para atingir este objetivo.

Fábio Porto participou do Painel "A Computação e a pesquisa aplicada no Combate ao COVID". Neste painel, Cristina Asvolinsque Pantaleão Fontes (UFF), Fábio Porto (LNCC) e Paula Cristina dos Santos (USP) discutiram os enfrentamentos reais e diretos que já ocorrem e oportunidades futuras no combate ao grande inimigo global.

O evento ocorreu entre os dias 10 e 14 de agosto e foi transmitido remotamente.

Mais informações:

<http://ev-ppgc.ic.uff.br/2020-2/paineis.html>



LNCC

otícias



Foto: Matheus B. de Mendonça

www.lncc.br