

ISSN 2594-8997

Vol. 1, nº6
Junho de 2018



LNCC

Notícias

www.lncc.br



Laboratório
Nacional de
Computação
Científica

30
ANOS

1980-2018

www.lncc.br

Fazendo ciência desde 1980

www.lncc.br

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/MCTIC).

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 César Gadelha Vieira

Diretor Substituto: Wagner Vieira Léo

Coordenação de Gestão e Administração – COGEA

Coordenadora - Anmily Paula dos Santos Martins

Área de Comunicação Social do LNCC - ARCOS

Responsável pela ARCOS e pelo LNCC Notícias: Genilda Roli

Diagramação e *design*: Matheus B. de Mendonça

Secretária: Tathiana Tapajós

Redação: Camila Tavares

Programação Web: Coordenação de Tecnologia da Informação e Comunicação (COTIC)

Serviço de Suporte de Sistemas e Redes

Redação do Informativo: Laboratório Nacional de Computação Científica – LNCC - Sala 2D10

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

Contatos: Tel.: +55 (24) 2233 6240 | E-mail: arcos@lncc.br

DIRETOR DO LNCC PARTICIPA DE COMITIVA DO MCTIC EM CABO VERDE PARA TRATAR DA IMPLEMENTAÇÃO DO AIR CENTRE

O Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, compôs a comitiva do Ministro da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações, Gilberto Kassab, que participou do Terceiro Diálogo de Alto Nível Indústria-Ciência-Governo

deste Centro tem como premissa a cooperação técnico-científica nas áreas de oceanos, espaço, big data e mudanças climáticas.

Desempenho (SINAPAD) que é uma rede de centros de computação de alto desempenho, geograficamente



Ministro da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações, Gilberto Kassab, acompanhado da delegação brasileira, com participantes do evento em frente à Biblioteca Nacional da cidade de Praia (Cabo Verde). Foto: Ascom/MCTIC

O Diretor do LNCC apresentou palestra sobre "Scientific Infrastructure for Big Data", onde mostrou a competência do Brasil nesta área e a possibilidade de uso do centro de supercomputação do LNCC e do SINAPAD, apontando exigências específicas de recursos humanos e de infraestrutura para o tratamento de dados em larga escala a serem gerados nos projetos do AIR Centre.

distribuídos, instituída pelo MCTIC. São nove unidades, denominadas "Centros Nacionais de Processamento de Alto Desempenho" (CENAPADs), operadas respectivamente pela UFRGS, UFMG, UFC, UNICAMP, UFRJ, UFPE, INPE, INPA e LNCC.

Na ocasião, o Diretor do INPE, Ricardo Galvão e o Diretor do MCTIC, Andrei Polejack, também ministraram palestras. Saiba mais sobre o SINAPAD: O LNCC coordena o Sistema Nacional de Processamento de Alto



**LNCC ABRE INSCRIÇÕES
PARA ESCOLA DE
INVERNO
SUPERCOMPUTADOR
SDUMONT 2018**

O LNCC realiza, entre os dias 1º e 10 de agosto, a Escola de Inverno Supercomputador Santos Dumont 2018, que tem como objetivo principal prover à comunidade de usuários do Sdumont minicursos sobre ferramentas de perfilagem, modelos de programação e linguagens para o desenvolvimento de algoritmos paralelos otimizados, onde o usuário venha a utilizar os recursos computacionais do SDumont de forma mais eficiente e, conseqüentemente, obter menor tempo de execução nas suas aplicações. De forma a fomentar a formação de recursos humanos na área de Computação de Alto desempenho, pretende-se permitir também a participação de profissionais da área de computação que desejam

Desempenho", "C para Programação Paralela", "Fortram para Programação Paralela", "Introdução ao ambiente SDUMONT /SLURM e Ferramentas BULLX-DE", "Fundamentals of Deep Learning for Computer Vision: An Introduction", "Introdução à E/S Paralela no SDUMONT", "Introdução à Programação CUDA", "Introdução ao uso de containers em Computação de Alto desempenho", "Introdução à Programação Paralela de Aceleradores em OpenCL", "Introdução à Programação em Aceleradores com Diretivas", "Introdução a Programação com MPI", "Introdução à Intel Parallel Studio XE", "Introdução a Programação MPI com Extensões para E/S (MPHIO)", "Introdução a Programação Paralela/OpenMP" e

dos minicursos quando atingir o número máximo de 40 pessoas por minicurso. O valor da inscrição é de R\$ 60,00 com direito a escolha de 5 minicursos. Para se inscrever, acesse:

http://www.lncc.br/eventoSeminario/loginCPF.php?id_evento=1821



LNCC PARTICIPA DE SIMPÓSIO SOBRE REDES DE COMPUTADORES E SISTEMAS DISTRIBUÍDOS EM CAMPOS DO JORDÃO

Pesquisadores do LNCC participaram do Simpósio Brasileiro de Redes de Computadores e Sistemas Distribuídos (SBRC), no período de 6 a 10 de maio, em Campos do Jordão (São Paulo). Os pesquisadores do LNCC, Antônio Tadeu, Artur Ziviani e Bruno Schulze, fizeram parte do Comitê de Programa do SBRC. Esse é um evento anual promovido pela Sociedade Brasileira de Computação (SBC) e pelo Laboratório de Redes de Computadores (LARC). Ao longo de mais de três décadas de realização, o SBRC firmou-se como

Escola de Inverno Supercomputador



aprender técnicas de desenvolvimento de programas paralelos. A programação conta com os minicursos "Introdução ao Linux para Processamento de Alto

Desempenho em ambiente HPC", que acontecem nos horários de 08h30 às 17h30, com horário de almoço entre 12h30 às 13h30. A organização do evento encerrará as inscrições

o mais importante evento científico nacional em redes de computadores e sistemas distribuídos, e um dos mais concorridos em informática. Bruno Schulze, a bolsista de pós-

nas áreas de infraestrutura virtualizada, serviços e aplicações, relacionados aos temas de elasticidade de aplicações, alocação de máquinas virtuais, eficiência energética, migração

desempenho de um simulador numérico distribuído e tolerante a falhas baseado no modelo de atores" no WCGA. Artur Ziviani apresentou um minicurso intitulado "Humanos no ciclo de comunicação: facilitadores das redes de próxima geração" em conjunto com Rafael Lima Costa (INRIA Saclay e UFBA), Leobino Sampaio (UFBA), e Aline Carneiro Viana (INRIA Saclay). Também organizou a reunião do Comitê Técnico de Monitoramento de Redes (CT-Mon) da RNP, do qual é coordenador desde 2014. Participou ainda como debatedor convidado de um painel realizado no workshop da RNP sobre dados abertos de pesquisa na área de redes de computadores. Ziviani foi premiado junto com a aluna de mestrado Juliana Mascarenhas pelo melhor artigo publicado no WBlockchain 2018, intitulado "Análise da Rede de Transações do Ethereum", e também recebeu menção honrosa pelo artigo "Arquitetura de Provisão de Qualidade de Serviço para Aplicações Distribuídas de Alto Desempenho em Redes Definidas por Software" (publicado no WGRS 2018). Os trabalhos foram realizados em parceria com colaboradores da Universidade Federal de Juiz de Fora (UFJF/MG).



Antônio Tadeu no estande do projeto HPC4e

doutorado do LNCC Mariza Ferro e Tiago Ferreto (PUC-RS) formaram o grupo de Co-Presidentes do XVI Workshop de Computação em Clouds e Aplicações (WCGA 2018). Esse workshop, realizado em conjunto com o SBRC, contou com 11 artigos completos para publicação e apresentação oral

entre nuvens, entre outros. Antônio Tadeu representou o projeto HPC4e durante o Workshop da Rede Nacional de Ensino e Pesquisa (WRNP) que ocorre todo ano junto ao SBRC, bem como apresentou o trabalho de doutorado de seu aluno Franklin Zillmer intitulado "Avaliação de



LNCC INICIA PROJETO DE PESQUISA COM CENPES E UNISINOS COM FOCO NO PRÉ-SAL

LNCC recebeu, nos dias 8 e 9 de maio, representantes da Universidade do Vale do Rio dos Sinos (UNISINOS) e do Centro de Pesquisa da Petrobras (CENPES) para dar início às atividades previstas em um projeto de cooperação científica nas áreas

O LNCC, através do grupo COMOHR (Computational Modeling of Hydrocarbon Reservoirs Group), desenvolve o papel de modelagem multiescala e desenvolvimento de métodos de simulação numérica de escoamentos e geomecânica de meios porosos típicos dessas regiões estudadas. Os resultados são propriedades petrofísicas equivalentes para sub-regiões que poderão ser usadas em simuladores de reservatórios.

O Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, chefiou a delegação brasileira na Segunda Reunião Plenária do Grupo de Trabalho de Computação de Alto Desempenho dos BRICS, realizada de 10 a 12 de abril, na cidade de Pune, na Índia. Na ocasião, o Diretor do LNCC ministrou palestra sobre “Current Trends and Roadmap of ICT and HPC in Brazil” e propôs cinco áreas consideradas pelo Brasil como prioritárias para cooperação entre os países do BRICS: saúde (doenças negligenciadas: vírus Zika, febre amarela, entre outras); energia (não renováveis, novas e renováveis); proteínas (fármacos, estrutura de proteínas); clima (previsão do tempo, poluição, mudanças climáticas, aplicação em agricultura); populações, migrações e seus impactos econômicos (simulação de movimentos migratórios).

Gadelha mencionou também o interesse nos tópicos de Inteligência Artificial (Machine Learning e Deep Learning); Big Data e Analytics em aplicações em Agricultura, Meio Ambiente e Estudos Sociais; IoT (Internet of Things) – sensores, redes, cidades inteligentes, controle de pragas e zoonoses; Segurança Cibernética



Foto: Camila Tavares

de modelagem computacional geológica e matemática de reservatórios de petróleo e gás denominado VISCARB - Atlas Digital Interativo com Visualização 3D de Análogos em Várias Escalas e Modelagem Multiescala. O projeto de pesquisa tem como foco o estudo e modelagem de formações geológicas com presença de fraturas e cavernas típicas dos reservatórios de petróleo e gás do pré-sal brasileiro.



DELEGAÇÃO BRASILEIRA, CHEFIADA PELO DIRETOR DO LNCC, PARTICIPA DE REUNIÃO SOBRE COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO NA ÍNDIA

BATE-PAPO COM PESQUISADORES DO LNCC NO EVENTO PINT OF SCIENCE ATRAI GRANDE PÚBLICO

Edição Genética", intitulada CRISPR/Cas9, um mecanismo de defesa antigo e natural encontrado inicialmente em diversas bactérias, que além de ser uma ferramenta de edição de



No período de 15 a 17 de maio, o evento Pint Of Science Festival atraiu um grande público, em 56 cidades de todo o Brasil, em torno de diversos temas tratados em cerca de 500 bate-papos com pesquisadores de diferentes instituições, entre elas dois pesquisadores do LNCC, Ana Tereza Vasconcelos e Artur Ziviani. No primeiro dia do evento, no Bar Teto Solar (RJ), Ana Tereza Vasconcelos, coordenadora do Laboratório de Bioinformática e da Unidade de Genômica Computacional Darcy Fontoura de Almeida, ambos do LNCC, falou sobre "A Nova Ferramenta de

genoma poderia, por exemplo, ser usado para introduzir genes que podem lentamente matar os mosquitos que transmitem malária. No dia 17 de maio, no bar Na Garganta – Cultura Pub, em Juiz de Fora (MG), Artur Ziviani participou de bate-papo sobre "Tecnologia, pra que te quero?" e falou sobre os impactos da ciência de dados na sociedade.



LIONS CLUB PREMIA ALUNA DO LNCC NA CATEGORIA JOVEM CIENTISTA POR PESQUISA SOBRE ALZHEIMER



Delegação brasileira na reunião em Pune, Índia, em companhia do coordenador/anfitrião do evento Dr. Sanjay Wandhekar, Diretor Associado do Center for Development of Advanced Computing (CDAC) da Índia. Na foto, da esquerda para a direita: Augusto Gadelha, Jairo Panetta, Philippe Navaux, Sanjay Wandhekar e Victor Mammana.

A mestranda em Modelagem Computacional do LNCC, Ana Luiza Karl, recebeu o prêmio de Jovem Cientista, do Lions Clube Petrópolis, no dia 19 de maio, no campus da Faculdade Arthur Sá Earp Neto - Faculdade de Medicina de Petrópolis (FASE/FMP). Anualmente, o Lions Clube

ferramentas de atracamento molecular proteína-ligante para o planejamento de inibidores da enzima acetilcolinesterase, considerada como importante alvo para o desenvolvimento de tratamento quimioterápico contra a doença de Alzheimer, com a colaboração de um grupo experimental do Instituto de

viabilizaram o depósito de uma patente nacional e outra internacional (colaboração LNCC e IQ/UFRGS), além da publicação de dois artigos em periódicos: European Journal of Medicinal Chemistry, em 2016; e Journal of Brazilian Chemical Society, em 2017. O estudo é de grande relevância, pelo fato do grupo experimental possuir dados in vitro da potência e seletividade desses inibidores, porém, não ter informações sobre como interagem com seu receptor biológico (acetilcolinesterase). E, uma vez que os métodos experimentais para a obtenção do modo de ligação possuem alto custo econômico e de tempo, ferramentas da modelagem molecular puderam ser utilizadas no intuito de tentar prever a formação do complexo acetilcolinesterase e os inibidores, bem como as principais características dessa interação.



ASSOCIAÇÃO INTERNACIONAL DE LIONS CLUBES
DISTRITO LC-1
GOVERNADOR: CL BENEDITO CHIARADIA

PRÊMIO LIONS 2018



Agraciados do Prêmio Lions:

HUMANITÁRIO: PROPAZ GCM Petrópolis
ESPORTE: Hingo Hammes
EMPRESA CIDADÃ: UNIMED Petrópolis
EDUCAÇÃO: Henry David Grazinoli
SAÚDE: Willian Tannure
CULTURA: TM Produções e Eventos
EDUCAÇÃO PARA O TRÂNSITO: Luciano Moreira
EDUCAÇÃO: Village International Biligual School
JOVEM CIENTISTA: Ana Karl
MEIO AMBIENTE: Frederico Procópio Mendes
COMUNICAÇÃO: TV ICE

de Petrópolis realiza uma homenagem a personalidades, empresas e entidades, em diferentes áreas de atuação.

Ana Luíza foi indicada para receber a premiação por sua pesquisa sobre "Modelagem Molecular de Inibidores Potentes e Seletivos para a Enzima Acetilcolinesterase" que, com orientação do pesquisador do LNCC, Laurent Dardenne, e coorientação da pós-doutoranda do LNCC, Isabella Alvim Guedes, utilizou em seu trabalho

Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS). Em 2016, o trabalho ficou em segundo lugar nos destaques da Jornada de Iniciação Científica do LNCC, permitindo sua indicação e premiação ao Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica do CNPq 2016, na categoria de Ciências da Vida, e recebeu, em 2017, o 14º Prêmio de Destaque na Iniciação Científica e Tecnológica do CNPq, também na categoria Ciências da Vida.

Os resultados da pesquisa



**LNCC ABRE INSCRIÇÕES
PARA A IX ESCOLA DE
MODELAGEM MOLECULAR
EM SISTEMAS BIOLÓGICOS
(IX EMMSB)**

Estão abertas as inscrições para a IX Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos (IX EMMSB) que acontece entre os dias 20 a 24 de agosto de 2018, na sede do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC/MCTIC), em Petrópolis/RJ. O evento é organizado pelo LNCC, pela Fundação Oswaldo Cruz (FIOCRUZ), pelo Instituto de

molecular aplicada ao desenvolvimento de fármacos, metodologias de docking receptor-ligante, métodos de aprendizagem de máquina e cálculos estocásticos e quânticos sobre biomoléculas.

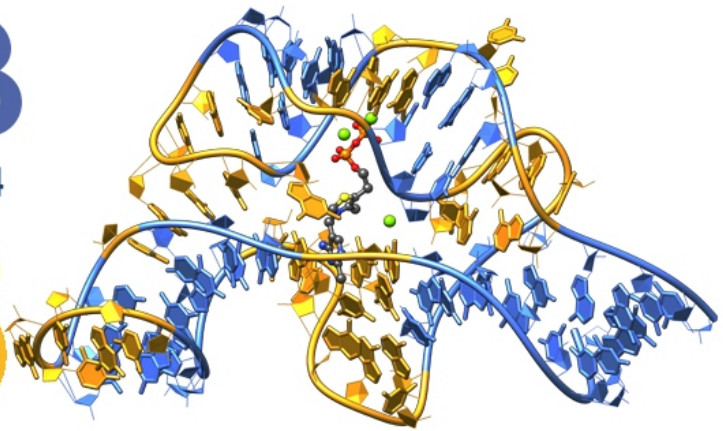
Serão ministradas 24 palestras e oferecidos 9 minicursos práticos. O prazo para inscrição se encerra no dia 29 de junho. São oferecidas 180 vagas para as aulas teóricas

(inscrições, resumos aceitos, minicursos e apresentações orais) será divulgado na página inicial do evento, até o dia 06 de julho de 2018. Para inscrição, acesse: <http://www.emmsb.lncc.br>

Confira a programação completa da IX EMMSB no seguinte endereço eletrônico: <http://www.emmsb.lncc.br/index.php?pagina=2#programa>

IX Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos

9 EMMSB
LNCC, de 20 a 24
Agosto | **2018**
www.emmsb.lncc.br



Biofísica Carlos Chagas Filho (IBCCF) e pelo Departamento de Ciência da Computação–UFJF.

A nona edição do evento conta com a participação de alunos e pesquisadores interessados em áreas relacionadas à modelagem molecular computacional, dinâmica molecular, modelagem

(palestras) e 120 vagas para as aulas práticas. A seleção dos pré-inscritos terá a seguinte ordem de prioridade: alunos de pós-graduação, alunos de graduação, pesquisadores-doutores.

O resultado dos alunos selecionados para a IX EMMSB





LNC3

otícias



Foto: Matheus Mendonça

www.lnc3.br