

ISSN 2594-8997

Vol. 1, nº9

Setembro de 2018



# LNCC

*otícias*

[www.lncc.br](http://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: Ellen Bessa

**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

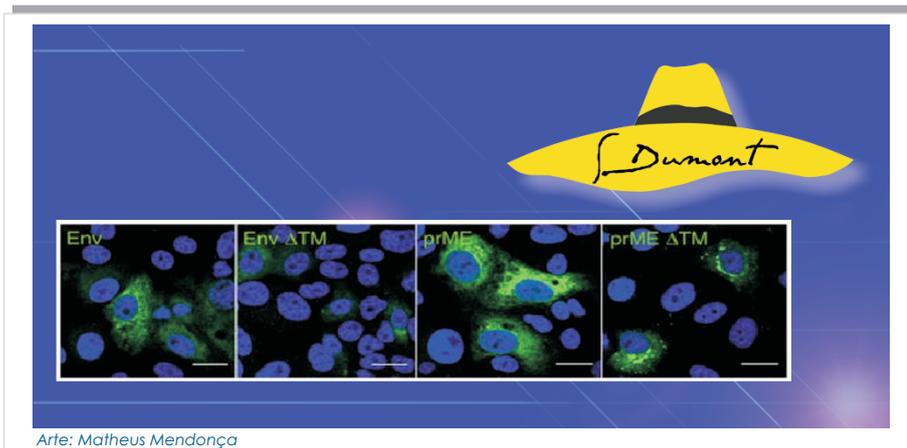
Contatos: Tel.: +55 (24) 2233 6240 | E-mail: [arcos@lncc.br](mailto:arcos@lncc.br)

## SUPERCOMPUTADOR SANTOS DUMONT AUXILIA NO DESENVOLVIMENTO DE VACINA CONTRA O VÍRUS DA ZIKA

Proteínas e Biomiméticos com Potencial em Diagnóstico e Vacinal para os Vírus Dengue e Zika". O vírus Zika (ZIKV) causou um surto notavelmente explosivo nas Américas e representou uma das

um novo ensaio imunológico para atestar a eficácia das vacinas. Desenvolvidas por colaboradores experimentais da Universidade de Oxford (Reino Unido) e da Universidade de Glasgow (Escócia), as vacinas foram testadas em camundongos e os resultados indicaram que duas das quatro vacinas desenvolvidas induzem a produção de anticorpos neutralizantes (aqueles capazes de parar a replicação viral) de longa duração.

O trabalho foi publicado no periódico *Nature Communications* com o título "*Rational Zika vaccine design via the modulation of antigen membrane anchors in chimpanzee adenoviral vectors*" e está disponível no seguinte endereço eletrônico: <http://www.nature.com/articles/s41467-018-04859-5>.



Arte: Matheus Mendonça

Uma vacina contra o vírus da Zika foi desenvolvida com o auxílio do supercomputador Santos Dumont, instalado na sede do LNCC, em Petrópolis (RJ). O trabalho de simulação computacional foi desenvolvido pelo estudante de doutorado em Química, da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Danilo Fernandes Coêlho, sob a supervisão do pesquisador Roberto Lins, do Departamento de Virologia do Instituto Aggeu Magalhães (IAM) da Fundação Oswaldo Cruz em Pernambuco (Fiocruz Pernambuco), que também coordenou o projeto de alocação computacional intitulado "Engenharia de

maiores emergências de saúde pública da história do Brasil com rápida disseminação para mais de 70 países. Sua associação de ZIKV com síndrome de Guillain-Barré, microcefalia em recém-nascidos e transmissão de pessoa para pessoa reforçou a necessidade de uma vacina eficaz que forneça imunidade anti-ZIKV duradoura. Atualmente, não existem vacinas ou antivirais licenciados para o Zika com o objetivo de prevenir ou tratar infecções.

Nesta pesquisa, foi identificada e caracterizada estruturalmente uma sequência de proteína específica do vírus da Zika. Baseada nessa sequência, quatro novas vacinas foram desenvolvidas, juntamente com



## O SUPERCOMPUTADOR SDUMONT DÁ SUPORTE AO EXPERIMENTO LHCB DO CERN

Coordenador de Computação do "LHCb Experiment" do CERN (Organização Europeia para a Pesquisa Nuclear), Stefan Roiser,

enviou correspondência ao Secretário de Políticas e Programas de Pesquisa e Desenvolvimento do MCTIC, Álvaro Prata, e ao Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, reconhecendo a importância do apoio do LNCC ao disponibilizar recursos computacionais do supercomputador Santos Dumont para o experimento Large Hadron Collider beauty (LHCb), um dos quatro grandes experimentos do CERN, que investiga a evolução do Universo após o Big Bang.

Os experimentos realizados no Large Hadron Collider (LHC), mais potente acelerador de partículas do mundo, precisam armazenar e processar uma imensa quantidade de dados. A única maneira de realizar isto é usando tecnologias de computação distribuída de última geração, como grades de computação distribuída, recursos de nuvem e centros de Computação de Alto Desempenho (HPC – High Performance Computing). Uma parte importante do LHCb é a simulação de dezenas de milhões de colisões de partículas por dia, utilizando métodos de Monte Carlo em dados coletados no LHC, o que consome grande parte dos recursos computacionais. O Brasil, através do SDumont, se aliou, a

partir de abril deste ano, a outros países no suporte de HPC para essas simulações. Stefan Roiser também agradeceu a equipe do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), sob a coordenação técnica de Renato Santana, e mencionou que existe uma grande expectativa do CERN no uso em maior escala do SDumont no futuro, permitindo um fortalecimento na colaboração entre o Brasil e o CERN.



## ARTIGO DE EX-ALUNO DO LNCC SOBRE NOVA ABORDAGEM PARA O CONTROLE DE SUPERBACTÉRIA É PUBLICADO NA SCIENTIFIC REPORTS

Resultados da tese do ex-aluno de Doutorado do LNCC, Pablo Ivan Pereira Ramos, e atual pesquisador da Fiocruz Bahia, foram publicados na revista *Scientific Reports* (Nature group), com o título “*An integrative, multi-omics approach towards the prioritization of Klebsiella pneumoniae drug*

*targets*”. O trabalho, realizado em conjunto com as pesquisadoras do LNCC, Marisa F. Nicolás e Ana Tereza R. de Vasconcelos, também contou com a participação de Darío Fernández Do Porto, Esteban Lanzarotti, Ezequiel J. Sosa, Germán Burguener, Agustín M. Pardo, Cecilia C. Klein, Marie-France Sagot, Ana Cristina Gales, Marcelo Marti, Adrián G. Turjanski. Os autores conseguiram priorizar 29 alvos moleculares para desenho de antimicrobianos contra a *Klebsiella pneumoniae* super resistentes. Para isso, aplicaram abordagens de genômica, drogabilidade estrutural do proteoma, reconstrução de vias metabólicas buscando choke-point e centralidade na rede, dados de expressão gênica frente a diversos estresses bacterianos e usando critérios de off-target tal como ausência de homólogos em humanos bem como nos comensais no microbioma intestinal. Resistência a antibióticos em bactérias representa uma preocupação global de saúde e novas abordagens são necessárias para enfrentar o crescente problema aos tratamentos atuais. A *Klebsiella pneumoniae* é uma bactéria oportunista, disseminada globalmente, que pode causar

pneumonia, além de ser responsável por muitos surtos de infecção em ambientes hospitalares, sendo particularmente agressiva para recém-nascidos e adultos sob cuidados intensivos. Os resultados do trabalho apontam para novos alvos para o controle da bactéria e patógenos bacterianos relacionados. E fornece uma estrutura para a qual essas novas estratégias podem ser desenvolvidas e adaptadas para uso.

O artigo pode ser acessado no seguinte endereço eletrônico:  
<https://www.nature.com/articles/s41598-018-28916-7>



## LNCC SEDIA O WORKSHOP DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS PARCIAIS (XVII WPDE2018)

LNCC é um dos patrocinadores e sedia, de 11 a 14 de setembro de 2018, o XVII Workshop on Partial Differential Equations (XVII WPDE2018), reconhecido pelo CNPq e CAPES como evento

tradicional da área de Equações Diferenciais Parciais. Fizeram parte da Comissão Organizadora do evento, os pesquisadores do LNCC, Jaime E. Munoz Rivera e Gustavo Perla Menzala; a aluna de Doutorado do LNCC, Martha Hilda Timoteo Sanchez; os professores Marcelo Cavalcanti (UEM), Carlos A. Raposo da Cunha (UFJF), Mauro de Lima Santos (UFPA) e Hugo Fernandez Sare (UFJF).

O Workshop tem como principais objetivos promover e incentivar a interação entre cientistas teóricos e aplicados na área de Equações Diferenciais Parciais (modelagem determinística), estabelecendo um fórum interdisciplinar para discutir desenvolvimentos e resultados sobre os problemas nas Equações Diferenciais Parciais. O evento tem como tópicos principais os Problemas de Estabilização de Sistemas Hiperbólicos; Estabilização de Sistemas e Sistemas Parcialmente Dissipativos com Amortecimento Indefinido; Termoelasticidade, Magnetoelasticidade e Viscoelasticidade; Modelagem de Materiais Inteligentes; Controle de Sistemas Distribuídos; Leis de Conservação e assuntos relacionados. A programação inclui palestras plenárias de 50 minutos, palestras de 30 minutos,

comunicações de 20 minutos e apresentações de pôster. Participam do evento palestrantes de diversos países (EUA, Alemanha, Chile, Peru e França) e do Brasil.



## COORDENADORA DO LNCC REALIZARÁ WORKSHOP DE MULHERES EM HPC NA COLÔMBIA

A tecnóloga sênior e coordenadora do CENAPAD (Centro de Processamento de Alto Desempenho) no LNCC, Carla Osthoff, participará da Conferência Latino-Americana sobre Computação de Alto Desempenho (CARLA), em Bucaramanga (Colômbia), de 26 a 28 de setembro e apresentará o trabalho "Fine-tuning an OpenMP-based TVD Hopmoc method using Intel Parallel Studio XE tools on Intel Xeon Architectures" desenvolvido pelo projeto multi institucional entre o LNCC, UFF, CEFET-RJ e Universidade Federal de Lavras, intitulado "Pesquisa e desenvolvimento de otimizações e modernização de código para

## LNCC REALIZA A IX ESCOLA DE MODELAGEM MOLECULAR EM SISTEMAS BIOLÓGICOS (IX EMMSB)

práticos (básicos e avançados) distintos, envolvendo diversos programas e abordagens computacionais. O evento foi considerado um sucesso tanto



Alunos, professores e palestrantes reunidos em frente ao supercomputador Santos Dumont  
Foto: Paulo Faria

**D**e 20 a 24 de agosto de 2018, foi realizada a IX Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos ([www.emmsb.lncc.br](http://www.emmsb.lncc.br)) no LNCC.

A IX EMMSB contou com 31 palestrantes e professores de mini-cursos práticos, e 179 alunos participantes efetivos (de 300 inscritos sendo 212 selecionados). Foram submetidos 158 resumos, apresentados na forma de pôster, dos quais 8 foram selecionados para apresentação oral no evento. Nesta edição, foi criado o Prêmio Prof. Paulo Mascarello Bisch de melhor pôster.

Além das palestras, foram ministrados nove mini-cursos

pelos palestrantes quanto pelos alunos e em várias palestras foram apresentados resultados de simulações realizadas no supercomputador Santos Dumont. Foi observado o seguinte perfil dos alunos participantes em um amplo espectro de áreas de atuação (e.g., Biologia, Química, Computação, Modelagem Computacional, Biofísica, Biotecnologia, Física, Farmácia, Bioquímica):

- Formação: Doutorandos (33%); Mestrandos (31%); Graduandos (23%) e Pesquisadores/Pós-docs (13%)

- Estados: RJ(71); SP(30); MG(25); PA(14); RS(8); RN(7); CE(7); PB(5);

métodos numéricos de diferenças finitas para solução de equações diferenciais parciais em arquiteturas paralelas híbridas” e com apoio do PCI/LNCC através do bolsista Frederico Luiz Cabral.

Carla Osthoff além de apresentar um trabalho, realizará o I Workshop de Mulheres em HPC (Computação de Alto Desempenho, do inglês High Performance Computing), inspirado em modelos internacionais dos Estados Unidos e Alemanha, com o objetivo de ser uma ação afirmativa para atrair as mulheres para a área técnico-científica. Segundo a tecnologista, ao longo dos anos que tenho dado aula, a porcentagem de mulheres que fazem ciência da computação vem diminuindo. A área está ficando cada vez mais masculina. Não é só no Brasil, é um fenômeno mundial. Com essa ação a tentativa é trazer mais mulheres para essa área e ajudar as que já estão a terem um universo melhor de trabalho.

O evento CARLA é anualmente realizado em diferentes países da América Latina. E, em 2015, aconteceu no Brasil, sendo sediado no LNCC, em Petrópolis/RJ.



PE(3); PR(2); GO(1); ES(1); BA(1); AL(1); PI(1); Estrangeiros(2)

O evento foi organizado pelo LNCC, Fundação Oswaldo Cruz (FIOCRUZ), Instituto de Biofísica Carlos Chagas Filho (IBCCF) e pelo Departamento de Ciência da Computação – UFJF.



## PESQUISADORA DO LNCC PARTICIPA DE MINI PÓS-DOUTORADO NO INSTITUTO PASTEUR

A pesquisadora do LNCC, Kary Ocaña, participou de um mini pós-doutorado, no período de 2 de abril a 26 de junho de 2018, realizado no Centro de Bioinformática, Bioestatística e Biologia Integrativa do Instituto Pasteur (Paris/França), liderado pelo pesquisador Olivier Gascuel. Parte dos resultados do projeto desenvolvido “Tree Predictions based on Eigenvalues Calculation applying Machine Learning” foram apresentados no 1º Encontro Fluminense de Mulheres em Biomatemática (EFMB, <http://dippg.cefet-rj.br/efmb/>) no dia 17 de agosto no Rio de Janeiro.



## LNCC REALIZA TREINAMENTO NO SEI PARA COLABORADORAS DO CBPF

A responsável pelo Serviço de Gestão e Desenvolvimento de Pessoas do LNCC, Bárbara Elustondo, em conjunto com a equipe da COGEA/LNCC, Larissa Barbosa e



Colaboradoras do CBPF participam de treinamento no SEI realizado pela COGEA/LNCC | Foto: Ellen Bessa

A Coordenação de Gestão e Administração (COGEA) do LNCC, em parceria com as Unidades de Pesquisa do MCTIC para o desempenho das funções em comum e como multiplicador do SEI, realizou na sede do Laboratório, no dia 4 de setembro, um treinamento para colaboradoras do Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF/MCTIC) sobre o Sistema Eletrônico de Informações (SEI), uma ferramenta que permite a produção, edição e assinatura de documentos e trâmites de processos eletrônicos por meio do próprio sistema.

Jaqueline Almeida, realizaram o treinamento de Brenda Sadocci (COGEA) e das colaboradoras do CBPF, Adriana Souza de Oliveira (Diretoria), Fagna Nunes da Silva (COADM), Carla Lustoza Vasconcelos e Luciene de Oliveira Silva, ambas do Setor de Importação. Na ocasião, a Coordenadora de Gestão e Administração (COGEA), Anmily Martins, falou sobre a Formalização dos Processos na Gestão.



## RESIDENTE NA INCUBADORA LNCC É CLASSIFICADO NO PROGRAMA DE ACELERAÇÃO T380 E ASSINA CONVÊNIO COM A EMBRAPA

**A**R4 Enterprise Ltda, empresa residente na Incubadora LNCC desde junho/2016, foi selecionada no Programa de Aceleração T380 que tem como objetivo principal desenvolver startups mundiais com potencial de alto impacto.

O Programa T380, uma parceria entre a aceleradora Techmall e o Instituto A-380, desenvolve o Programa em três fases:

- 1) identificar startups com potencial de alto impacto em fase de vendas,
- 2) acelerar, preparar para investimento e conectar aos investidores exclusivos do Programa, e
- 3) transformar o potencial em escala junto ao investimento possível, aos métodos de desenvolvimento de startups, às conexões e ao conhecimento.

Ao todo foram classificadas 10

(dez) startups que participaram de um programa de aceleração com chance de investimento. O projeto inovador apresentado pela R4 Enterprise envolve um aplicativo que realiza uma ponte para preencher a lacuna entre a ciência e o mercado com baixo custo e alta performance.

No início do mês de agosto, a R4 Enterprise assinou convênio com a Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (Embrapa) para o desenvolvimento de software estatístico.

Segundo Marcos Huber, sócio da R4, a parceria será importante para o fortalecimento do empreendimento inovador. O software permitirá fazer análise de séries temporais e identificar padrões não aleatórios na série temporal de uma variável de interesse. A observação deste comportamento passado pode permitir fazer previsões sobre o futuro, orientando a tomada de decisões.

A Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (Embrapa) é vinculada ao Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA) e é uma empresa de inovação tecnológica focada na geração de conhecimento e tecnologia para agropecuária brasileira.

Acreditamos que o convênio entre a R4 e a Embrapa será uma parceria estratégica para o amadurecimento do empreendimento residente em nossa Incubadora.



## PROGRAMA DE VISITAS TÉCNICAS DO LNCC RECEBE MAIS DE 250 PESSOAS EM 2018

**D**e março a agosto de 2018, o LNCC recebeu mais de 250 participantes do Programa de Visitas Técnicas. No mês de agosto, no total, o LNCC recebeu a visita de 44 alunos. No dia 2 de agosto, 20 alunos do Colégio Betel de Queimados (RJ) participaram de visita técnica e assistiram à apresentação do tecnologista Roberto Souto. No dia 3 de agosto, 24 estudantes do Instituto Federal de Minas Gerais (IFMG) participaram do programa e assistiram à palestra do tecnologista Antonio Tadeu Gomes. O Programa de Visitas Técnicas permite a estudantes de instituições de ensino, públicas e particulares, assistir a vídeos e

palestras institucionais e fazer visitas, orientadas por Robson Fernandes (ATOS/BULL), ao supercomputador Santos Dumont. Outras visitas já estão agendadas para os próximos meses.

Os interessados devem entrar em contato com a Área de Comunicação Social (ARCOS/COGEA), pelo e-mail [arcos@lncc.br](mailto:arcos@lncc.br) ou pelo telefone (24) 2233 6101/6245. As visitas são agendadas de acordo com a disponibilidade de vaga.



## LNCC RECEBE VISITA DE EXECUTIVOS INTERNACIONAIS AO SUPERCOMPUTADOR

No dia 30 de agosto, o LNCC recebeu a visita de executivos acompanhados de Carlos Terra, Diretor de Operações da Orange Business Services, empresa global de telecomunicações, com sede no Parque Tecnológico da Região Serrana (PT-RS), que está comemorando 10 anos em Petrópolis. Os executivos, 17 no total, de diversas nacionalidades e brasileiros de outras localidades



Executivos da Orange em frente ao Supercomputador Santos Dumont.

Executivos participam de visita guiada ao interior do Supercomputador Santos Dumont.



Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, fala sobre o Laboratório aos executivos da Orange. Foto: Ellen Bessa



foram recebidos pelo Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, que falou sobre o Laboratório, as expectativas para o futuro e as relações com outros países. Em seguida, Robson Fernandes (ATOS/BULL) acompanhou o grupo em visita guiada ao interior do supercomputador.

## LNCC PARTICIPA DO CONGRESSO INTERNACIONAL VERY LARGE DATA BASES NO RIO DE JANEIRO

A 44ª Conferência Very Large Data Bases aconteceu, de 27 a 31

de agosto de 2018, no Hotel Windsor Barra, no Rio de Janeiro. O fórum, realizado anualmente, tem como objetivo apresentar resultados de pesquisas na área de gerenciamento e análise de dados bem como tutoriais, demonstrações e workshops para pesquisadores da área, fornecedores e profissionais.

Estão à frente na organização do evento, o Tecnologista do LNCC, Fabio Porto, Alberto Laender (UFMG), e Marco Antonio Casanova (PUC-RJ). Participam também da organização do evento, o Tecnologista do LNCC, Artur Ziviani, o analista de sistemas sênior Adolfo Simões e o analista de sistema pleno Enver Anibal Choque Cayo, além de alunos da pós-graduação apoiando a organização como voluntários. O Diretor do LNCC, Augusto Gadelha, prestigiou o evento no dia 28 de agosto.

O VLDB 2018 é um evento técnico-científico internacional envolvendo a academia, indústria e o governo. São apresentados trabalhos nas áreas de gerência e análise de dados em grandes volumes e soluções para problemas enfrentados por grandes empresas.



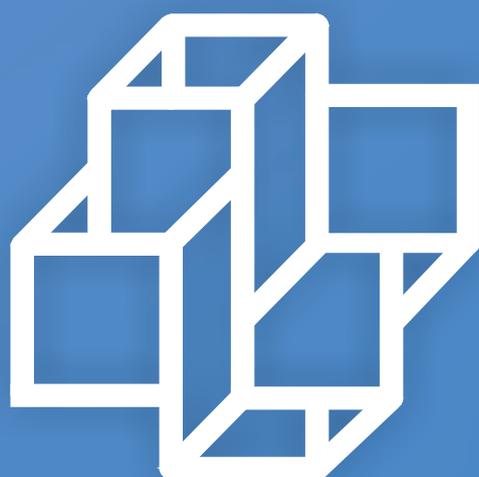
Prof. Fabio Porto, pesquisador do LNCC e organizador do evento no Brasil, realiza palestra de abertura. | Foto: Divulgação/VLDB2018



Equipe de voluntários da VLDB2018 | Foto: Divulgação/Raquel Lopes



Parte dos pesquisadores que participaram da VLDB 2018 | Foto: Divulgação/VLDB2018



# LNCC

otícias



Foto: Matheus B. de Mendonça

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