



Laboratório  
Nacional de  
Computação  
Científica

UNIDADE DE PESQUISA DO MCTI

---

RELATÓRIO  
Grupos de Pesquisa  
**2020**

---

# Sumário

|                |     |
|----------------|-----|
| Prefácio ..... | 02  |
| PIVIC .....    | 03  |
| ACiMA .....    | 11  |
| PAD .....      | 18  |
| MDA .....      | 31  |
| DEXL .....     | 35  |
| SCP .....      | 49  |
| GCQC .....     | 56  |
| COMOHR .....   | 62  |
| ASTOP .....    | 69  |
| NUMA .....     | 75  |
| IPES .....     | 88  |
| MIE .....      | 95  |
| LABINFO .....  | 98  |
| GMMSB .....    | 131 |
| BAMC .....     | 142 |
| HeMoLab.....   | 148 |
| TMG .....      | 162 |
| ESDA .....     | 170 |
| GCON.....      | 175 |
| ComCiDis ..... | 184 |

# Prefácio



**Augusto Cesar Gadelha**

DIRETOR DO LNCC

Desde 2019, ao final de cada ano o LNCC promove ao longo de dois dias um ciclo de palestras nas quais seus 20 Grupos de Pesquisa (GP) apresentam as atividades desenvolvidas no ano e seus projetos futuros. Os GPs não representam instâncias administrativas na estrutura do LNCC mas identificam os grupos de pesquisadores que desenvolvem projetos em um dado tema. A identificação de tais GPs tem sido útil para uma melhor compreensão e transparência das várias pesquisas sendo desenvolvidas na instituição, permitindo uma melhor gestão das metas e resultados alcançados. Para melhor percepção dos temas tratados, os GPs são classificados em 8 áreas do conhecimento: Computação de Alto Desempenho; Ciência de Dados; Criptografia; Energia; Métodos Matemáticos e Algoritmos; Bioinformática e Biologia Computacional; Saúde; Sistemas e Controles. A característica multidisciplinar do LNCC, aliada ao fato dos métodos matemáticos e computacionais da Computação Científica serem aplicados na modelagem e simulação de uma grande variedade de sistemas e fenômenos, é evidenciada pela diversidade de projetos executados.

Neste ano de 2020 o LNCC comemorou 40 anos de sua criação, com um histórico de realizações bem sucedidas. Infelizmente, foi também um ano marcado pela tragédia da pandemia COVID-19 que nos obrigou a manter distância, nos isolarmos em regime de quarentena. Quando, no início de março, os pesquisadores tiveram que trabalhar em *home-office*, minha expectativa era que tudo ficaria normalizado após alguns poucos meses e que o temor de nossa produção científica ser prejudicada não se justificaria. Porém, o que logo vimos foi uma superação às limitações então

impostas pela pandemia com o uso disseminado de várias plataformas de comunicação e *lives* que permitiram mantermos reuniões virtuais, seminários, cursos e o trabalho em casa. Certamente, a falta de convívio presencial tem efeitos indesejáveis e desejamos que, em breve, possamos voltar às discussões presenciais em nossas salas e em torno de uma mesa de almoço. No entanto, mesmo se estendendo até o final do ano, o isolamento forçado não prejudicou a produção científica do LNCC que atingiu plenamente as metas numéricas e qualitativas estabelecidas no final do ano passado. Os dois dias dos seminários dos GPs demonstraram tal fato. Neste sentido, nossos pesquisadores merecem o reconhecimento e nossos aplausos por manterem seus ritmos de trabalho e sua produtividade apesar das adversidades que nos assolaram.

O Fórum de Grupos de Pesquisa, como denominamos esses dois dias de seminários, teve sua realização possível pelo trabalho dedicado de várias pessoas, em especial dos Pesquisadores e Coordenadores Frederic Valentin, Márcio Murad e Artur Ziviani, respectivamente, da Coordenação de Métodos Matemáticos e Computacionais (COMAC), da Coordenação de Modelagem Computacional (COMOD) e da Coordenação de Pós-Graduação, que coordenaram toda a programação do evento. Para tal contaram com o inestimável e competente suporte secretarial da Jeane Ramos e da Juliana Pinheiro. Mas o sucesso desse Fórum, que ocorreu de forma virtual pela Internet, deve ser creditado não somente aos organizadores, mas principalmente à participação e à excelência das apresentações que retrataram todas as atividades de pesquisa desenvolvidas neste 2020. A todos, o nosso agradecimento institucional.



# PIVC

PROCESSAMENTO DE IMAGENS E VISUALIZAÇÃO CIENTÍFICA



***Gilson Antonio Giraldi***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

Neste grupo, são desenvolvidas pesquisas na área de processamento e análise de imagens, com vistas a segmentação, restauração, classificação, síntese e extração de características. Para estas tarefas, são aplicadas técnicas tradicionais bem como métodos em aprendizagem de máquina. Por outro lado, trabalhamos também com técnicas de computação gráfica e modelagem para visualização científica e animação computacional.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Membros da COMAC: Bruno Schulze, Fábio Porto, Jauvane Cavalcante de Oliveira
- Membro da COMOD: José Karam Filho

#### **1.1.2. Alunos e Pós-Doutores**

Doutorandos no LNCC:

- Éden Pereira
- Eliaquim Monteiro Ramos
- Paulo A. Braz
- Ítalo Messias Félix Santos

Doutorando no Programa NanoBioSistemas

- Ivânia Maria Lucinda De Donato

Iniciação Científica (IC):

- Arthur Gonze Machado(UFJF)
- Lucas Laheras (Centro Universitário FEI)

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

Nacionais

- Leandro Tavares da Silva (CEFET-Petrópolis)
- Paulo Sérgio Silva Rodrigues (FEI - (SP))
- Antonio Lopes Apolinário Junior (UFBA)
- Marcelo Bernardes Vieira (UFJF)
- Carlos Eduardo Thomaz (FEI – São Bernardo do Campo (SP))
- Tiene André Filisbino (CEDERJ)
- Vinicius Moreira Mello (UFBA)
- Gastão Florêncio Miranda Junior (UFS)
- Marlo Moesia Barroso (Colaborador LNCC)
- Mauren Louise Sguario Coelho de Andrade
- Raul Feitosa (PUC-Rio)
- Marcelo Faria (UERJ)
- Aura Conci (UFF)
- Victor Paulo Azevedo Valente da Silva (ICMBio)
- Luiz Antonio Pereira Neves (UFPR)

Estrangeiros

- Jaime Santos Cardoso (Universidade do Porto - Portugal)

#### **1.1.4. Bolsistas**

- André de Souza Brito (PCI-NCC)
- Liliane Almeida (PCI-LNCC)
- Maira B.H. Moran (UFF-UERJ)

### **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

- Tema 1: Análise de Imagens: Pesquisa em técnicas de processamento de imagens e reconhecimento de padrões baseado em técnicas tradicionais e métodos de aprendizagem de máquina.
- Tema 2: Visualização Científica: Pesquisa de técnicas de computação gráfica e modelagem para animação e visualização de resultados numéricos obtidos via simulação computacional
- Tema 3: Aprendizagem de Máquina: Pesquisa de técnicas em redes neurais para análise e síntese de imagens e dados numéricos

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas na Pós-Graduação do LNCC
  - GA-023: Elementos de Processamento de Imagens
  - Estudo Dirigido: Aprendizagem de Máquina para Análise e Síntese de Dados
  - Estudo Dirigido: Métodos Avançados em Otimização de Topologias de Redes Neurais Profundas com Aplicações em Petróleo
- Minicursos / Escolas / Congressos
  - Animação Computacional de Fluidos via Métodos Baseados em Partículas: Escola de Verão LNCC (2020)

## **2. Projetos de Pesquisa**

### **2.1. National Institute of Science and Technology in Medicine Assisted by Scientific Computing (INCT-MACC):**

Instituto virtual integrando pesquisadores distribuídos entre 35 instituições nacionais e 17 no exterior. Coordenadores: Prof. José Eduardo Krieger (InCor, SP) Vice-Diretores: Prof. Marco Antonio Gutierrez (InCor, SP), Prof. Pablo Javier Blanco (LNCC) e Prof. Raúl A. Feijóo (LNCC). Valor: 9.978.081,00 Reais. Agências Financiadoras: MCT/CNPq/CAPES/FAPs. Vigência 28/11/2016 a 30/11/2022

### **2.2. VISCARB:**

ATLAS DIGITAL INTERATIVO COM VISUALIZAÇÃO 3D DE ANÁLOGOS EM VÁRIAS ESCALAS E MODELAGEM MULTIESCALAR. Coordenador Técnico: Luiz Gonzaga da Silveira Junior (UNISINOS). Projeto com parceria LNCC, UNISINOS, e CENPES/PDEP/GGGR.

### 2.3. Formação de Recursos Humanos FEI-LNCC-Unicamp:

Formação de Doutores em Engenharia Elétrica nas Áreas de Saúde e Energia. Projeto multi-institucional envolvendo FEI, UNICAMP e LNCC. Coordenador geral: Prof. Marcelo Antonio Pavanello (FEI). Coordenador local na Unicamp é o Prof. José Alexandre Diniz e no LNCC o Prof. Gilson Antonio GiralDI. Financiamento CNPq (Chamada No. 01/2019).

## 3. Destaques Científicos e Tecnológicos

- 3.1. Melhor Trabalho na Seção Oral do *XIII Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional (EAMC 2020)*, Laboratório Nacional de Computação Científica: Apresentação do trabalho “*Segmentação de imagens digitais via modelos variacionais com restrições relaxadas*” feita pelo então aluno de mestrado Ítalo Messias Felix Santos, meu orientando, com coorientação do Prof. Abimael Loula. O artigo em questão trata de resultados da dissertação do aluno referentes a processamento de imagens utilizando técnicas variacionais e equações diferenciais parciais.
- 3.2. Menção Honrosa na Jornada de Iniciação Científica do LNCC: O trabalho em questão, com título “*Simulação de Fluidos Direcionados por Campos Tensoriais para Animação*”, está sendo desenvolvido pelo aluno Arthur Gonze Machado, graduando da UFJF, com coorientação do Prof. Marcelo B. Vieira (UFJF). O projeto de IC tem como objetivo estudar e desenvolver novos métodos para animação de fluidos, com controle obtido via campos tensoriais. Desta forma, o objetivo principal do trabalho é desenvolver um modelo de projeção anisotrópica robusto que viabilize o uso de campos tensoriais como forma efetiva de controlar o fluido.
- 3.3. Menção Honrosa na Jornada de Iniciação Científica do LNCC: O trabalho em questão, com título “*Segmentação de Imagens Utilizando Algoritmos Bio-Inspirados e Redes Neurais com Aplicações para Imagens Médicas e Biológicas*”, foi desenvolvido pelo aluno Lucas Pampolin Laheras, graduando do Centro Universitário da FEI (SP), com coorientação do Prof. Paulo Sérgio Silva Rodrigues (FEI). O projeto de IC tem como objetivos: (a) Desenvolvimento de uma plataforma interativa para segmentação das imagens de interesse; (b) Treinamento tradicional de redes neurais convolucionais; (c) Utilização do software desenvolvido na primeira etapa dentro de uma metodologia de aumento de dados para melhorar o treinamento da rede neural.

## 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos Publicados em Periódicos

Judice, Sicília Ferreira ; ANTONIO GIRALDI, GILSON . Fluid Animation Using Sketching, Diffusion-Reaction and Lattice Boltzmann Models. IEEE Latin America Transactions, v. 18, p. 514-521, 2020.

Leandro Tavares da Silva ; GIRALDI, GILSON A. . Fixed point implementation of a variational time integrator approach for smoothed particle hydrodynamics simulation of fluids. COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, v. 79, p. 1111-1130, 2020.

Marlo Moesia Barroso ; José Karam F. ; GIRALDI, GILSON A. . Domain Extensions of Binomial Numbers Applying Successive Sums Transformations on Sequences Indexed by Integers. TEMA. Tendências em Matemática Aplicada e Computacional, v. 21, p. 133-155, 2020.

Eliaquim Monteiro Ramos ; DARZE, G. M. ; NASCIMENTO, F. R. ; FACCINI, J. L. H. ; GIRALDI, GILSON A. . Comparison of Dynamic Mode Decomposition and Deep Learning Techniques for Two-Phase Flows Analysis. FLOW TURBULENCE AND COMBUSTION, v. 1, p. 1-36, 2020.

FILISBINO, T. A. ; GIRALDI, GILSON A. ; C.E. Thomaz . Nested AdaBoost procedure for classification and multi-class nonlinear discriminant analysis. SOFT COMPUTING, v. 1, p. 1-22, 2020.

FILISBINO, T. A. ; GIRALDI, GILSON A. ; C.E. Thomaz . Support Vector Machine Ensembles for Discriminant Analysis for Ranking Principal Components. MULTIMEDIA TOOLS AND APPLICATIONS, v. 1, p. 1-37, 2020.

#### **4.2. Artigos Completos em Anais de Eventos**

Eden Pereira da Silva ; Eliaquim Monteiro Ramos ; Leandro Tavares da Silva ; J.S. Cardoso ; GIRALDI, GILSON A. . Video Summarization Through Total Variation, Deep Semi-Supervised Autoencoder and Clustering Algorithms. In: 15th International Joint Conference on Computer Vision Theory and Applications (VISAPP), 2020, Valletta. Anais of the VISAPP 2020, 2020. p. 1-8.

Ítalo Messias Felix Santos ; GIRALDI, GILSON A. ; Abimael Dourado Loula. Segmentação de imagens digitais via modelos variacionais com restrições relaxadas. In: XIII Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional (EAMC), 2020, Petrópolis. Proc. of the EAMC2020, 2020. p. 47-56.

Ítalo Messias Felix Santos ; GIRALDI, GILSON A. ; BLANCO, Pablo. J. ; Abimael Dourado Loula . Parameterizing Variational Methods Through Data-Driven Inverse Problems for Image Processing Applications. In: 27th International Conference on Systems, Signals and Image Processing (IWSSIP), 2020, Niteroi, RJ. Proc. of the 27th International Conference on Systems, Signals and Image Processing, 2020. v. 1. p. 1-6.

Luiz Antonio Pereira Neves ; Kevin Santos Martins ; William Ricardo Santos Lima ; GIRALDI, G.A. . QRCode DOOR Project: Access Control Application using QR Code Image. In: CONTENT 2020, The Twelfth International Conference on Creative Content Technologies, 2020, Nice, France. Proc. of the Twelfth International Conference on Creative Content Technologies, 2020. p. 11-16.

Lucas Pampolin Laheras; GIRALDI, GILSON A.; RODRIGUES, Paulo Sérgio; Francisco Jose Pereira Lopes. Plataforma Semi-Automática para Segmentação de Imagens Biológicas com Auxílio de Algoritmos Bio-Inspirados. In: SciBiz: Science Meets Business, Anais do SciBiz 2020, p.1 - 10, São Paulo

MORAN, M. B. H.; Marcelo D. Brito Faria; GIRALDI, GILSON A.; BASTOS, L. F.; Bruno da Silva Inacio; CONCI, A. On using convolutional neural networks to classify periodontal bone destruction in periapical radiographs. In: International Workshop on Biomedical and Health Informatics, Proceedings of IEEE BIBM, 2020. p.1 - 4, (To Appear)

### 4.3. Dissertações e Teses Defendidas

Italo Messias Felix Santos. Modelos Variacionais Aplicados a Computação Visual. 2020. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Gilson Antonio Giraldi.

### 4.4. 4.4 Artigos Aceitos Para Publicação em Revista

1. Lucas Carlini; MIRANDA JUNIOR, G. F.; GIRALDI, GILSON A.; C.E. Thomaz. A new method of selecting safe neighbors for the Riemannian Manifold Learning algorithm. IEEE Latin America Transactions. Ano 2020

2. Eliaquim Monteiro Ramos; DARZE, G. M.; FACCINI, J. L. H.; GIRALDI, GILSON A. Dynamic mode decomposition of numerical data in natural circulation. BRAZILIAN JOURNAL OF RADIATION SCIENCES. Ano 2020. OBS: Trabalho publicado no INAC 2019 que será publicado também na revista supracitada por convite dos editores

3. MORAN, M. B. H.; Marcelo D. Brito Faria; GIRALDI, GILSON A.; BASTOS, L. F.; CONCI, A. Using super-resolution generative adversarial network models and transfer learning to obtain high resolution digital periapical radiographs. COMPUTERS IN BIOLOGY AND MEDICINE. Ano 2020. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0010482520304704>

### 4.5. Resumo Expandido Publicado em Evento

Lucas Pampolin Laheras; RODRIGUES, Paulo Sérgio; GIRALDI, GILSON A. Algoritmos Bio-Inspirados e Redes Neurais Aplicados à Segmentação de Imagens Médicas. In: X Simpósio de Iniciação Científica, Didática e de Ações Sociais da FEI (SICFEI), Anais do SICFEI 2020, p.1 - 2, São Bernardo do Campo (SP).

### 4.6. Desenvolvimento de Software

Recentes avanços na microscopia confocal por varredura a laser, associado ao uso de marcadores fluorescentes, têm possibilitado a geração de dados a cerca dos níveis de expressão gênica e localização proteica tanto em células fixadas quanto *in vivo*. Assim, no trabalho de IC do aluno Lucas Pampolin Laheras (vide item 3.3) desenvolvemos um software, denominado *CellDetectionImage*, que incorpora um framework semi-automático para a segmentação de imagens biológicas cujo código fonte está disponível em: <https://github.com/LucasLaheras/CellDetectionImage>.

O *CellDetectionImage* está sendo desenvolvido na linguagem Python, em colaboração com o grupo do Prof. Francisco José Pereira Lopes, biólogo da UFRJ-Duque de Caxias e vem sendo utilizado para segmentação de imagens biológicas de microscopia de óvulos de *Drosophilas*. Com este aplicativo, poderemos gerar imagens anotadas (padrão-ouro) que possam ser utilizadas para treinamento de redes neurais profundas, que podem aprender a realizar a segmentação automática das imagens.

## 5. Impactos da Pesquisa na Sociedade

5.1 Projeto de Colaboração LNCC e Instituto Chico Mendes de Conservação da Biodiversidade: Desenvolvimento de Sistema de Informação Integrando Dados e Classificação de Imagens Georreferenciadas para Geração de Mapas de Cobertura e Uso do Solo da Região de Petrópolis

O projeto trará um avanço importante para a categorização do uso do solo na região de Mata Atlântica, buscando, inclusive, uma definição dos estágios sucessionais da Mata Atlântica a partir de imagens aéreas que serão captadas com

o drone/VANT de propriedade do ICMBio. Com o processamento das imagens e geração de ortomosaicos pela equipe de computação deste projeto, espera-se criar uma padronização para as regras de uso do solo na região de Petrópolis e partes de Magé, Guapimirim e Duque de Caxias, permitindo uso sustentável dos recursos naturais. O projeto visa criar regras claras, factíveis e acessíveis a toda a população quanto ao ordenamento do solo da Unidade de Conservação, identificando as áreas prioritárias para a conservação e aquelas em que pode haver uma expansão da urbanização e ocupação.

5.2 INCT-MACC: O desenvolvimento de recursos em segmentação e análise de imagens radiológicas da região buco-maxilo-facial permitirá a geração mais rápida e eficientemente de diagnósticos tendo impacto direto no atendimento aos pacientes do Núcleo Especial de Radiologia da Policlínica Piquet Carneiro da UERJ.

5.3 VISCARB: A utilização de métodos em aprendizagem de máquina na área de exploração de petróleo e gás tem impacto direto na redução do custo computacional de tarefas, tais como *upscaling* de quantidades físicas de interesse. Por outro lado, pode aumentar a capacidade preditiva dos algoritmos, tendo, portanto, alto impacto econômico.

## 6. Organização de Congressos

- Participação no Local Program Committee do IWSSIP 2020
- Member of the Program Committee:
- International Conference on Image Analysis and Recognition. 2020
- 33rd Conference on Graphics, Patterns, and Images (Sibgrapi). 2020
- International Joint Conferences on Artificial Intelligence and the 17th Pacific International Conference on Artificial Intelligence. 2020. (Congresso).
- International Conference on Pattern Recognition (ICPR). 2020.
- SBCAS, SBGames 2020
- Revisor de Artigos Científicos Submetidos ao CBIS 2020

## 7. Atividades Projetadas para 2021

- Ministrando cursos de Aprendizagem de Máquina e Processamento de Imagens no Programa de Pós-Graduação stricto sensu Interunidades e Multi-institucional em NanoBiosistemas
- Organização de edição especial na revista *Current Chinese Computer Science*, onde atuou como Section Editor. *Special Issue: Homomorphic Data Analysis and Machine Learning*

- Processamento de imagens e dados no contexto do Projeto em Colaboração com ICMBio para atualização dos mapas de cobertura e uso do solo da Área de Proteção Ambiental de Petrópolis
- Publicação de Artigos em Revistas e Conferências
- Estender colaborações nacionais e internacionais
- Continuar ministrando cursos na PG-LNCC e orientação de alunos



# ACiMA

LABORATÓRIO DE AMBIENTES COLABORATIVOS E MULTIMEDIA APLICADA



***Jauvane Cavalcante de Olivera***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

Ambiente Virtuais são implementações de sistemas de Realidade Virtual, onde um usuário é imerso em um mundo sintético controlado por computadores. Neste mundo sintético o usuário pode ter experiências de interesse. Treinamento e reabilitação motora tem sido áreas de exploração de tais ambientes, que podem ainda ser colaborativos, quando um grupo de usuários interagem entre si através do Sistema. Um outro tipo de Sistema que também pode ser explorado nestes contextos são sistemas de realidade aumentada, onde ao invés do usuário ser imerso em um mundo totalmente sintético, apenas se acrescenta conteúdo virtual de interesse ao mundo real.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

Jauvane C.de Oliveira, COMAC Gilson

Antônio Giraldi (Colaborador)

#### **1.1.2. Bolsistas**

Raquel Ellem M.de Oliveira, M.Sc.,LNCC (PCI)

Graziele Weinchutz Kapps, M.Sc.,LNCC (PCI)

Lorran Reder Ferreira, B.Sc.,LNCC (PCI)

#### **1.1.3. Alunos e pós-Doutores**

- Doutorandos: Francielly Munique da S. Rodrigues (LNCC)
- Mestrandos: Antônio Luis Carlúcio Doneda (IME), SilasLuisFurtado C.C.deLima(IME)
- IC: Ana Luíza Buse da Silva (IME), Artur Santiago de O.Meneses (IME) e GustavoAlvesCasqueiro(IME)

#### **1.1.4. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:
  - Paulo Fernando Ferreira Rosa(IME)
  - Luiz C.P. R. Velho(IMPA)
  - Selan Rodrigues dos Santos(UFRN)
  - Liliane dos Santos Machado (UFPB)
  - Pablo A. Baier(IFCE)
- Internacionais:
  - Shervin Shirmohammadi (Univ.ofOttawa, Canadá)

### **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

- Realidade Virtual: Ambientes de Realidade Virtual imergem o usuário em um mundo sintético, possibilitando-o a ter uma experiência de interesse em um contexto controlado.
- Realidade Aumentada: Ambientes de Realidade Aumentada acrescentam à cena real, um conjunto de conteúdos virtuais de interesse.
- Ambientes Virtuais Colaborativos: Sistema avançado que, através de sistemas de realidade virtual ou aumentada, permitem a interação de diversos usuários através do sistema.

- Sistemas Multimídia: Sistemas baseados em mídias básicas, tais como vídeo, áudio, imagens, animações, interações táteis, etc. Inclui compressão, codificação e transmissão de dados multimídia.

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Estruturas de Dados e Aplicações, LNCC
- Sistemas Multimídia, LNCC
- Tópicos Especiais em Realidade Virtual, LNCC
- Sistemas Multimídia, IME
- Tópicos Especiais em Realidade Virtual, IME

## **2. Projetos de Pesquisa**

### **2.1. Medicina Assistida por Computação Científica–INCT-MACC**

Responsável por desenvolver pesquisa e desenvolvimento de sistemas na seção de Realidade Virtual e Aumentada, onde desenvolvemos simuladores cirúrgicos e sistemas de reabilitação motora e psicológica. Financiados pelos CNPq e FAPESP. 2017 a 2022.

### **2.2. Desenvolvimento de um Sistema de Aeronaves Remotamente Pilotadas com Controle baseado em Alocação Dinâmica para Cobertura de Áreas com Prioridades de Interesse–PROCADDEFESA**

Propõe desenvolver um sistema para controle de múltiplas aeronaves remotamente pilotadas de pequeno porte (ARPs de classe3) em tarefas de monitoramento persistente por cobertura de área, aplicado a missões de ISR (Inteligência, Vigilância e Reconhecimento). Envolve IME, LNCC, IMPA, FT-Sistemas e IMBEL. Financiados pela Capes. Dez 2019 a Dez 2024

## **3. Destaques Científicos e Tecnológicos**

### **3.1. Sistema de Treinamento para Sinalizadores de Controle de Aeronaves**

Trata-se de um sistema de treinamento para sinalizadores de aeronaves que operam em embarcações, contando com um módulo imersivo para o observador em treinamento e um módulo do instrutor. Os resultados estão reportados em um trabalho de mestrado, bem como tendo sido publicado no Symposium on Virtual and Augmented Reality2020 (SVR2020 da SBC). O sistema foi experimentado por oficiais de instrutores (Figura1) e obteve o prêmio de melhor artigo de aplicação do SVR2020 (Figura2).



Figura 1: Oficial utilizando o sistema de treinamento, e interface observada



Figura 2: Prêmio de Melhor Artigo de Aplicação do SVR2020

### 3.2. Sistema para Tratamento de Abliopia

Este sistema apoia o tratamento de Ambliopia, também conhecida como Olho Preguiçoso. Trata-se de uma alternativa ao tratamento tradicional, que pode ser utilizado por profissionais da área oftalmológica para tratar crianças que tenham esta disfunção. O sistema foi apresentado em artigo no Symposium on Virtual and Augmented Reality2020 (SVR2020 da SBC), tendo sido experimentado por profissionais da área. O sistema é implementado através de um serious game, que atrai o público alvo, composto especialmente de crianças. O sistema é imersivo, e força o olho preguiçoso a trabalhar, o que a médio prazo reabilita a parte do cérebro que processa os dados capturados por aquele olho. O trabalho também resultou em uma dissertação de mestrado.

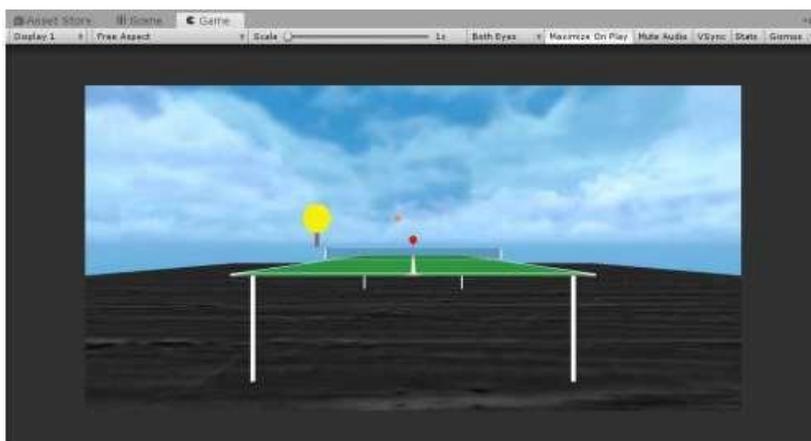


Figura3: Interface do Ambliopong, serious game para tratamento de ambliopia

### 3.3. Ambientes Virtuais para Reabilitação Terapêutica

Um conjunto de sistemas para reabilitação (motora) terapêutica foram desenvolvidos. Os sistemas variaram de sistemas imersivos a sistemas baseados em desktop, utilizando dispositivos táteis u dispositivos inerciais.



Figura4:Interface imersiva com dispositivos inerciais de sistema terapêutico  
O sistema foi documentado em artigo apresentado no Symposium Virtual and Augmented Reality (SVR2020 da SBC).

## 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- BAIER-SAIP, J.A.; BAIER, P.A.; DE FARIA, A.R.; OLIVEIRA, J.C.; BAIER, H. Shearlocking in one-dimensional finite element methods. EUROPEAN JOURNAL OF MECHANICS A-SOLIDS, v.79, p.103871-103886, 2020.
- MOREIRA, L.A.S.; JUSTEL, C.M.; OLIVEIRA, J.C.; ROSA, P. F.F. .Development of a Method for Data Dimensionality Reduction in Loop Closure Detection: An Incremental Approach. ROBOTICA, p.1-15, 2020.

#### **Aceitos para publicação:**

- MOREIRA, ERICK MENEZES ; LUIZ JUNIOR, FÁBIO; MOREIRA, L.S.; OLIVEIRA, J.C.; ROSA, P. F. F. . Rede IoT assistida por sistema de aeronaves remotamente pilotadas para apoio em operações de recuperação de desastres. REVISTA MILITAR DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA, 2020.
- MOREIRA, ERICK MENEZES ; OLIVEIRA, N. ; LUIZ JUNIOR, FÁBIO; MOREIRA, L.A.S.; OLIVEIRA, J.C.; ROSA, P. F. F. . Arquitetura de um sistema de múltiplas aeronaves remotamente pilotadas para operações em Defesa. REVISTA MILITAR DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA, 2020.
- BAIER-SAIP, JÜRGENA.; BAIER, PABLO A. ; Oliveira, Jauvane C.; BAIER, HERBERT. Higher Order Approximation to the Guidewire Model used in Simulators of Cardiac Catheterization and Multiple Segment Relaxations. PRESENCE-TELEOPERATORS AND VIRTUAL ENVIRONMENTS, 2020.

#### **4.2. Livros e Capítulos de Livros**

N/D

#### **4.3. Artigos em Anais de Eventos**

- DO PRADO, ALEX SILVA; de Oliveira, Jauvane C.. A serious game using virtual reality for treatment of Amblyopia. In: 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR), 2020, Porto de Galinhas. 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR). Los Alamitos, CA, EUA: IEEE, 2020. v.1. p.277-284.
- DE OLIVEIRA, RAQUEL ELLEM MARCELINO; DA CRUZ TEIXEIRA, CARINA; DE OLIVEIRA, JAUVANE CAVALCANTE .Virtual Environments for Therapeutic Rehabilitation. In: 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR), 2020, Porto de Galinhas. 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR). Los Alamitos, CA, EUA: IEEE, 2020. v.1. p.371-380.
- DONEDA, ANTONIO L.C.; de Oliveira, Jauvane C. .Helicopter visual signaling simulation: Integrating V-Rand M-L into a low-cost solution to optimize Brazilian Navy training. In: 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR), 2020, Porto de Galinhas. 2020 22<sup>nd</sup> Symposium on Virtual and Augmented Reality (SVR). Los Alamitos, CA, EUA: IEEE, 2020. v. 1. p. 434-442.

#### **4.4. Participação em Eventos Científicos**

- XXII Symposium on Virtual and Augmented Reality (Membro do Comitê de Programa, Apresentação de artigos, coordenação de sessão e avaliação de trabalhos de sessão)

#### **4.5. Palestra à Convite**

- Série LNCC 40anos – Ambientes Colaborativos e Multimídia Aplicada.

#### **4.6. Desenvolvimento de Programas e Produtos**

- Registro de Patente obtido: Sistema de Treinamento de Ressucitação Cardiorespiratória (depositado em 2012, obtido em 2020). Patente BR102012032446. Patente em nome apenas do LNCC (e dois autores na instituição).
- Sem registro de patente ou de software: Sistema de treinamento para sinalizadores de aeronaves em embarcações. Sistema para tratamento de ambliopia, sistema de tratamento motor terapêutico.

#### **4.7. Dissertações e Teses Defendidas**

- Erick Menezes Moreira. Redelo T assistida por sistema de múltiplas aeronaves remotamente pilotadas para operações de recuperação de desastres. 2020. Tese (Doutorado em Engenharia de Defesa) – Instituto Militar de Engenharia,.Coorientador: Jauvane Cavalcante de Oliveira.
- Tamirys Virgulino Ribeiro. SIMOBTURATION: Aplicação da Realidade Virtual para Simulação de Treinamento do Procedimento de Obturação Utilizando Dispositivo Tátil com 6GDL. 2020. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas - Informatica) – Instituto Militar de Engenharia, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Jauvane Cavalcante de Oliveira.
- Álex Silva do Prado. Um Jogo Sério Utilizando Realidade Virtual para o Tratamento de Ambliopia. 2020. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas - Informatica) – Instituto Militar de Engenharia, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Jauvane Cavalcante de Oliveira.
- Rômulo Girardi Moreira. Aplicação da Realidade Virtual no Adestramento do Observador de Artilharia e Generalização da Solução como Framework IMEVR. 2019. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas - Informatica) –Instituto Militar de Engenharia,. Orientador: Jauvane Cavalcante de Oliveira.

#### **5. Atividades Projetadas para 2021**

Em 2021 esperamos avançar no projeto CAPES PROCAD DEFESA, juntamente com o Instituto Militar de Engenharia (IME) e Instituto de Matemática Pura e Aplicada (IMPA). O projeto iniciou-se em dezembro de 2019, mas agora no final de 2020 é que deve efetivamente receber os recursos aprovados. Devemos publicar pelo menos dois artigos no SVR2021, mais outros tantos em outros eventos relacionados. Em 2021 devemos voltar a ter resultados novos com relação ao simulador de cirurgia de video laparoscopia, o que foi de certo modo adiado por conta da pandemia, mas outra fase do desenvolvimento que seria feita depois foi antecipado, de modo que no final o impacto da pandemia foi minimizado.

#### **6. Outras Informações Relevantes**

O website do grupo está disponível em <http://acima.lncc.br>



# PAD

COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO



***Carla Osthoff***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O desenvolvimento de softwares que possibilitam uma utilização eficiente dos recursos computacionais do SDumont e de máquinas de Computação de Alto Desempenho em geral é uma tarefa complexa que requer recursos humanos altamente especializados. O grupo de pesquisa do SEPAD, tem como objetivo auxiliar o desenvolvimento de Aplicações eficientes e escaláveis em máquinas de Computação de Alto Desempenho em colaboração com grupos de pesquisa em computação científica e oferecer cursos de formação de recursos humanos na área de PAD. O grupo desenvolve pesquisa na área de programação paralela, de programação distribuída, de E/S de dados paralelos e workflows científicos e Inteligência Artificial aplicada a HPC. Por final, o grupo PAD também desenvolve pesquisa para permitir uma utilização eficiente dos recursos computacionais oferecidos pelo portal web para usuários que não possuem expertise em programação paralela.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Roberto Pinto Souto (COTIC)
- Diego Carvalho (CEFET/RJ, Doutorado em IA pela COPPE/UFRJ ( Em processo de transferência)
- Douglas Cardoso (CEFET/ Petrópolis, doutorado em IA pela COPPE/UFRJ) (Em processo de transferência)
- Fabio Borges (COTIC)- Coordena grupo de pesquisa em segurança em TI.

#### **1.1.2. Tecnologistas**

- André Carneiro (COTIC): colaboração do Tema [3]: ( Cursando mestrado na UFRGS)
- Bruno Fagundes (COTIC): colaboração do Tema [3]: ( Membro da colaboração com a UFRGS)

#### **1.1.3. Analistas de TI**

- Frederico Cabral: colaboração do Tema [1 , 8 e 9]
- Stiw Herrera :colaboração do Tema [5]
- Maria Eugenia Welter: colaboração do Tema [4 e 7]
- Mateus Melo: colaboração do Tema [6]

#### **1.1.4. Alunos**

##### **• Doutorandos:**

Frederico Cabral: Tema 9: Projeto HPC em Computação Quântica que tem como objetivo pesquisar uma síntese de circuitos quânticos eficientes através de HPC. Colaboração Tema [9].

##### **• Mestrandos:**

Weber Ribeiro: Colaboração do Tema [5]: Colaboração Interna com o grupo de pesquisa de óleo e gás do LNCC no projeto "MÉTODOS NUMÉRICOS PARA O ESCOAMENTOS BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS EM AMBIENTES COMPUTACIONAIS DE ALTO DESEMPENHO". Publicações: 12

André Carneiro : Projeto do Tema [3]: Colaboração com a UFRGS no projeto "Pesquisa em Entrada e Saída de Grande Massa Dados em Ambientes de Computadores de Alto Desempenho". Publicações 9,13

- **Bolsistas PCI:**

Micaella Coelho: Projeto do Tema [2 e 8]: "Avaliação de Desempenho dos Recursos Computacionais do Supercomputador Santos Dumont no Apoio a Execução Eficiente de Experimentos Científicos em Larga Escala". Publicações : 2,6,7,10 e 11.

Thiago Teixeira: PROJETO do Tema [5 e 8]: OPORTUNIDADES DE OTIMIZAÇÃO EM MÉTODOS NUMÉRICOS PARA O ESCOAMENTOS BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS EM AMBIENTES COMPUTACIONAIS DE ALTO DESEMPENHO. Publicações : 9,13

- **Bolsistas PIBIC/LNCC:**

Gabriel Costa, Projeto tema [1] : 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 Haswell/Broadwell. Publicação: 8, selecionado como um dos melhores trabalhos na semana PIBIC/LNCC em junho de 2020.

Guilherme Freire, Projeto Tema [2] : Exploração de Módulos Paralelo-Híbrido de Bioinformática para Ambientes GPU de Supercomputação. Publicação: 10,6.

Lucas Cruz: Projeto Tema [2] : Projeto e Implementação de Workflows Científicos Reprodutíveis de Alto Desempenho. Publicação: 7,11. Menção honrosa na publicação do WSCDA-WIC . Publicação número 7.

## **Pesquisadores Colaboradores**

### **LNCC**

- Ana Tereza Vasconcelos. Colaboração Tema [2]
- Antonio Tadeu. Colaboração Tema [7]
- Frederic Valentin. Colaboração Tema [7]
- Kary Ocaña Colaboração Tema [2]
- Luiz Gadelha . Colaboração Tema [2]
- Marcio Borges. Colaboração Tema [5]
- Renato Portugal. Colaboração Tema [9]

### **Nacionais:**

- Universidade de São Paulo / IAG (Pedro Dias ), Colaboração Tema [4]
- Universidade Federal do Rio Grande do Sul (Philippe Navaux), Colaboração Tema [3]
- Instituto Tecnológico da Aeronáutica (Jairo Panetta ), Colaboração Tema [4]
- CEFET Rio de Janeiro (Diego Brandão ), Colaboração Tema [1]
- Universidade Federal Fluminense (Mauricio Kischinhevsky , Lúcia Drummond) Colaboração Tema [1]
- Universidade Estadual do Rio de Janeiro (Cristiana Bentes) Colaboração Tema [2]
- Universidade Federal de Lavras (Sanderson Oliveira ) Colaboração Tema [1]
- INPE (Haroldo Fraga de Campos Velho ) Colaboração Tema [7]

## **Internacionais:**

- INRIA (Francieli Boito e Jean Francois Mehaut). Colaboração Tema [3]
- Universidade da Costa Rica ( Esteban Meneses )

## **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

- Tema 1: Colaboração externa com UFF, CEFET/RJ e UFLavra no projeto "Pesquisa e desenvolvimento de otimização e modernização onde código para métodos numéricos de diferenças finitas para solução de equações diferenciais parciais em arquiteturas paralelas híbridas".O trabalho consiste na pesquisa de métodos e de técnicas de otimização e paralelismo para possibilitar uma utilização eficiente dos recursos computacionais em ambientes de computação de alto desempenho. Equações diferenciais parciais são uma ferramenta indispensável para a modelagem de diversos problemas de alta relevância, e em diversas áreas científicas, como por exemplo física, química e meteorologia. Esta pesquisa apresenta foca em estudos comparativos entre diferentes técnicas de paralelização utilizadas para aumentar o desempenho de métodos numéricos para resolução de equações diferenciais parciais hiperbólicas de problemas de convecção-difusão. O objetivo é avaliar os ganhos das estratégias desenvolvidas a partir da versão original do código, com o intuito de diminuir os tempos gastos em barreiras de sincronização, e compará-las entre si. Além disso, o trabalho trouxe novos estudos em relação às publicações anteriores envolvendo o método numérico HOPMOC com análise da relação entre Spin Time e CPU Time para comprovar a eficiência das estratégias desenvolvidas .Publicações: 1,4,5,8.
- Tema 2: Colaboração interna com o grupo de bioinformática no projeto : “ Portal Bioinfo”. Desenvolvimento de pesquisa para permitir uma utilização eficiente dos recursos computacionais oferecidos pelo do portal web para usuários que não possuem expertise em programação paralela. Publicações: 2,6,7,10, 11 e 16. A pesquisa tem como objetivo realizar estudos do comportamento de aplicações científicas de bioinformática quando acoplados nos recursos computacionais do Santos Dumont (SDumont), por meio da análise de desempenho dessas aplicações, a partir das suas configurações, parâmetros e natureza dos dados científicos. Bioinfo-Portal é um portal científico de bioinformática desenvolvido e hospedado no LNCC e é composto por diversas aplicações de bioinformática como software, workflows e algoritmos. Bioinfo-Portal, e suas aplicações, foi usado para os estudos de desempenho e escalabilidade nos recursos híbridos do SDumont. Este estudo de desempenho possibilitará identificar a melhor configuração para o uso eficiente do SD, o que levaria ao desenvolvimento de um portal científico “inteligente” e “verde”. Está inserido dentro de uma colaboração multidisciplinar no LNCC/MCTIC, através da colaboração interna entre o SEPAD e o projeto “Rede Avançada em Biologia Computacional” (RABICO). Inicialmente foram escolhidas três aplicações de bioinformática que representam três cenários diferentes no que se refere ao uso e acoplamento no SDumont. Análises de desempenho e a escalabilidade foram realizados nos recursos CPU do SDumont com aplicação RaxML e suas três versões

(MPI, threads e híbrido) a qual visa a construção de árvores filogenéticas. Os resultados dessa primeira pesquisa foram publicados em [2] e [6] e foram apresentados no relatório anterior, e possibilitou a utilização eficiente dos recursos do portal da bioinformática, gerando além disso uma publicação de nível Qualis B4 na conferência "Latin American High-Performance Computing Conference" [7]. Dando continuidade no segundo cenário foi realizado explorando os recursos GPU do SDumont realizando análises da aplicação BEAST 1.10, que gerou uma publicação de nível Qualis B4 em "Brazilian e-Science Workshop" [10]. O último cenário possibilitou a implementação e o desenvolvimento e análise de um workflow científico RNA-Seq, que gerou uma publicação no "Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho" [11].

- Tema 3: Colaboração com a UFRGS no projeto "Pesquisa em Entrada e Saída de Grande Massa Dados em Ambientes de Computadores de Alto Desempenho. Colaboração Externa: LNCC/ UFRGS." para o desenvolvimento de estudos relacionados com utilização eficiente do sistema de entrada e saída de dados do SDumont, e gerenciamento eficiente para manter e operar os nós de administração, nós de conectividade e autenticação, nós computacionais, equipamentos de armazenamento e a rede de comunicação. Publicações: 1 e 12. Plataformas de computação de alto desempenho (HPC) são utilizadas para resolver os mais diversos problemas científicos em pesquisa áreas, como biologia, química, física e ciências da saúde. Os pesquisadores usam uma infinidade de softwares científicos, que têm requisitos diferentes. Esses requisitos incluem entrada e operações de saída, que afetam diretamente o desempenho devido à diferença existente nas velocidades de processamento e acesso aos dados. Assim, os supercomputadores devem estar preparados para lidar com eficiência um cenário de carga de trabalho mista ao armazenar dados do formulários. Conhecimento do desempenho do conjunto de aplicativos rodando em um supercomputador é necessário para entender o uso do sistema de armazenamento, identificar possíveis gargalos e guiar técnicas de otimização. Esta pesquisa visa realizar um estudo sobre a infraestrutura de armazenamento de dados do supercomputador, avaliando o desempenho do sistema de arquivos Lustre em relação às cargas de trabalho variadas e suas demandas ao estudar o comportamento durante um longo período de operação, onde coletamos métricas e analisou o sistema de arquivos da máquina por três meses. As pesquisas desenvolvidas apontam para a necessidade de se melhorar o desempenho do sistema de E/S de dados do SDumont. Publicações: 1 e 12.
- Tema 4: Colaboração externa com USP/IAG/UFRGS no projeto de desenvolvimento de funcionalidades, aumento da escalabilidade e estudos numéricos com modelos atmosféricos de alta resolução: BRAMS e OLAM. "Trabalho que visa aumento de escalabilidade e migração de algumas partes do modelo meteorológico BRAMS para GPU e XEONPHI. " Dentro do contexto deste projeto foi desenvolvido a pesquisa de Otimização computacional do módulo de química do BRAMS através de técnicas de paralelismo em plataforma computacional multicore Xeon Scalable Processor. Os estudos permitiram a redução no tempo de execução do módulo da Química do BRAMS e aumento de 30% de desempenho no código de produção do BRAMS do CPTEC. A nova versão encontra-se disponível no site do CPTEC. Publicações: [14]

- Tema 5: Colaboração Interna com o grupo de pesquisa de óleo e gás do LNCC no projeto "MÉTODOS NUMÉRICOS PARA O ESCOAMENTOS BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS EM AMBIENTES COMPUTACIONAIS DE ALTO DESEMPENHO", Este trabalho está gerando um código escalável para ser executado de forma eficiente em ambiente de computação de alto desempenho. O método numérico utilizado inicialmente na nossa pesquisa é um programa pré-existente escrito em FORTRAN, que foi paralelizado através do padrão OpenMP. Do ponto de vista numérico, o modelo propõe a aplicação de um método de elementos finitos localmente conservativo para a velocidade da mistura e um método de volumes finitos de alta ordem, não-oscilatório, baseado em esquemas centrais, para a equação hiperbólica não-linear que governa a saturação das fases. Apesar de realizar cálculos de dados 3D, o código foi criado para realizar cálculos de dados em 2D inicialmente. Desta forma, na visão de boas práticas para paralelização de códigos, o trabalho realizado não é bem otimizado. O motivo principal da refatoração do código foi a necessidade de modificações na estrutura de dados da malha para que pudesse ser feita a divisão do domínio físico entre processos MPI, desta forma, possibilitando o código ser executado de forma paralela em MPI. O código refatorado foi escrito em Fortran e é composto por 8 módulos. No módulo principal Simulador.F90 o framework MPI está sendo utilizado para estratégia de decomposição de domínio. No momento o código apenas calcula o Transporte, porém, já apresenta resultados promissores onde pode ser obtido um speedup de 110x executando com 960 processos comparado a apenas um processo. O foco para o futuro é o aprimoramento do código para que ele tenha todas as funcionalidades do anterior e para que os Frameworks OpenMPI e OpenMP possam trabalhar juntos em uma estratégia Híbrida buscando um ganho de desempenho maior que ambas as estratégias separadas. Publicações: 9,13, 15
- Tema 6: Colaboração Interna com o grupo de pesquisa IPES (Innovative Parallel Finite Element Solvers), nos projetos " Simulação Multiescala de Problemas da Engenharia do Petróleo Usando o Método MHM" e "PADEF - Paralelização e Análise de Acurácia, Desempenho e Aplicabilidade de Simuladores baseados em Elementos Finitos". Publicações: 3
- Tema 7: colaboração 3d-VAR. Esta é uma colaboração com grupos de pesquisa do INPE (Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais), UFPel (Universidade Federal de Pelotas) e UFOPA (Universidade Federal do Oeste do Pará), no projeto "G-Assimila: Assimilação de Dados por Rede Neurais Artificiais". Assimilação de dados é um problema chave em sistemas de previsão de tempo operacional. A determinação da condição inicial é um dos pontos mais importantes para melhorar a previsão. Em previsão numérica do tempo, assimilação de dados é o processo que atualmente demanda o maior custo computacional de todo o sistema de previsão, pelo que se justifica o esforço na obtenção de ganho de desempenho via otimização e paralelização dos códigos utilizados nesta pesquisa. Projeto iniciado em junho de 2020.

- Tema 8: Projeto SUPERPD. Infraestrutura e suporte para os usuários da área de óleo e gás do Supercomputador Santos Dumont e pesquisa e desenvolvimento de otimizações em softwares de computação científica para aumentar a sua escalabilidade e eficiência em plataformas de Supercomputação. Colaboração Externa LNCC/Petrobras. Projeto iniciado em outubro de 2020.
- Tema 9: Projeto HPC em Computação Quântica. A síntese de circuitos quânticos eficientes é um desafio, especialmente quando se tenta considerar o menor circuito possível que execute uma determinada tarefa. Não existe um método geral o suficiente, que sirva para todos os algoritmos possíveis, por isso algumas técnicas têm seu valor em casos particulares. Uma abordagem possível, a mais intuitiva que se possa considerar, é a chamada força bruta, que por apresentar complexidade computacional exponencial em função do número de portas quânticas não é utilizado extensivamente, mas com o uso da Computação de Alto Desempenho (HPC em Inglês) pode se tornar uma saída para tal abordagem. Neste sentido, a parceria do grupo de pesquisa em HPC com o grupo de computação quântica é benéfica para ambos os grupos. Colaboração Interna SEPAD/ Grupo de computação Quântica do LNCC.

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação

GA-26: Algoritmos I

GB 100: Processamento Paralelo

- Mini-cursos / Escolas / Congressos

Escola Semestral Supercomputador Santos Dumont

O objetivo da escola é difundir conhecimento na área de programação em “Computação de Alto Desempenho” para que os usuários possam ter condições de executar os seus programas de forma mais eficiente dos recursos computacionais do SDumont. Foram ministrados minicursos sobre a utilização de modelos de programação paralela e sobre as ferramentas de perfilagem, que ajudam na identificação dos “gargalos” do código que necessitam ser otimizados. A escola ofereceu também minicursos introdutórios em gerenciamento de clusters.

## **2. Projetos de Pesquisa**

### **2.1. Projeto SUPERPD**

Financiado pela Petrobras. Infraestrutura e suporte para os usuários da área de óleo e gás do Supercomputador Santos Dumont e pesquisa e desenvolvimento de otimizações em softwares de computação científica para aumentar a sua escalabilidade e eficiência em plataformas de Supercomputação. Colaboração Externa LNCC/Petrobras

## 2.2. Projeto INRIA/LNCC

Projeto submetido para financiamento pelo INRIA e aguardando o julgamento para uma colaboração LNCC/INRIA, dentro do contexto do tema 3 citado na seção 1.2 acima: "Pesquisa em Entrada e Saída de Grande Massa Dados em Ambientes de Computadores de Alto Desempenho".

## 3. Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1. Destaque 1

Destaca-se, a participação com a pesquisa multidisciplinar integrando pesquisas de bioinformática a ambientes e tecnologias de supercomputação. Diversos experimentos científicos de genômica, filogenômica, entre outros foram abordados na sua modelagem, execução no ambiente de CAD do SINAPAD e Santos Dumont, e análise dos seus metadados científicos e proveniência. A colaboração com a Linha de Pesquisa em Bioinformática, focando na integração com pesquisadores nas linhas de CAD, Supercomputação, Ciência de Dados e Aprendizado de Máquina. Frutos dessas colaborações geraram diversas publicações no 2020, o Bioinfo-Portal foi desenvolvido, hospedado e administrado no LNCC, "Ocaña, K.A.C.S.; Galheigo, M.; Osthoff, C.; Gadelha, L.M.R.; Porto, F.; Gomes, T.A.; Oliveira, D.; Vasconcelos, A.T. BioinfoPortal: A scientific gateway for integrating bioinformatics applications on the Brazilian national high-performance computing network. Future Generation Computer Systems, v. 107, p. 192-214, 2020". **Publicações: 2,6,7,10 e 11**

### 3.2. Destaque 2

- Participação na elaboração e formação do SCALAC: ADVANCED COMPUTING SYSTEM FOR LATIN AMERICA AND THE CARIBBEAN, que tem como objetivo cooperar para o desenvolvimento de uma infraestrutura de Computação de Alto Desempenho para a América Latina e Caribe além de promover colaboração entre as instituições científicas e de prover formação de recursos humanos.
- Participação da mesa redonda "Americas HPC Collaboration" com parte do evento "Supercomputing 2020". O painel teve como objetivo discutir como aumentar a colaboração de forma continental ( América Latina e Caribe, USA e Canada), e foi composto por 5 "panelistas" : John Towns/ NCSA, Carla Osthoff/ LNCC, Daniel Gruner / Compute Canada, Keith Strier/ NVIDIA, Luis Eliécer Cadenas/ RedCLARA, onde fui convidada para representar o LNCC como um dos membros principais da América Latina.

## 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

[1] CABRAL, F. L. ; Gonzaga De Oliveira, S. L. ; OSTHOFF, C. ; COSTA, G. P. ; BRANDAO, D. N. ; Kischnevsy, M. *An evaluation of MPI and OpenMP paradigms in finite-difference explicit methods for PDEs on shared-memory multi- and manycore systems*. CONCURRENCY AND COMPUTATION-PRACTICE AND EXPERIENCE, v. 32, p. e5642, 2020. [doi.org/10.1002/cpe.5642](https://doi.org/10.1002/cpe.5642).

[2] Kary A.C.S.Ocaña, Marcelo Galheigo, Carla Osthoff, Luiz M.R.Gadelha Jr, Fabio Porto, Antônio Tadeu A.Gomes, Daniel de Oliveira, Ana Tereza Vasconcelosa. *A SCIENTIFIC GATEWAY FOR INTEGRATING BIOINFORMATICS APPLICATIONS ON THE BRAZILIAN NATIONAL HIGH-PERFORMANCE COMPUTING NETWORK*. Future Generation Computer Systems Volume 107, June 2020, Pages 192-214. [doi:10.1016/j.future.2020.01.030](https://doi.org/10.1016/j.future.2020.01.030).

[3] Gomes, A. T. A., Molion, E., Souto, R. P., & Méhaut, J. F. Memory allocation anomalies in high-performance computing applications: A study with numerical simulations. *Concurrency and Computation: Practice and Experience*. <https://doi.org/10.1002/cpe.6094>

#### 4.2. Livros e Capítulos de Livros

[4] Gonzaga de Oliveira, S.L.; CARVALHO, C. V. ; OSTHOFF, C. The influence of reordering algorithms on the convergence of a preconditioned restarted GMRES method..In: *The 20th International Conference on Computational Science and its Applications - ICCSA, 2020, Cagliari*. Lecture Notes in Computer Science. Cham: Springer, 2020. v. 12249. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4\\_2](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4_2).

[5] ROBAINA, D. T. ; Gonzaga de Oliveira, S.L. ; Kischnevsy, M. ; OSTHOFF, C. ; SENA, A. C. A convergence analysis of a multistep method applied to an advection-diffusion equation in 1-D.. In: *The 20th International Conference on Computational Science and its Applications - ICCSA, 2020, Cagliari*. Lecture Notes in Computer Science. Cham: Springer, 2020. v. 12249. [doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4_1)

#### 4.3. Artigos em Anais de Eventos

[6] OCAÑA, K.A.C.S.; Coelho, M. ; Freire, G. ; Osthoff, C. High-Performance Computing of BEAST/BEAGLE in Bayesian Phylogenetics using SDumont Hybrid Resources. In: *Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2020), 2020, Cuiabá, Mato Grosso*. Anais do XIV Brazilian e-Science Workshop, 2020. [doi.org/10.5753/bresci.2020.11190](https://doi.org/10.5753/bresci.2020.11190).

[7] Silva, L. C. ; Coelho, M. ; GADELHA, LUIZ M.R. ; OCAÑA, K.A.C.S. ; OSTHOFF, CARLA. Avaliação de Desempenho de um Workflow Científico para Experimentos de RNA-Seq no Supercomputador Santos Dumont. In: *Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho (WSCAD 2020 - WIC), 2020*. Anais do Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho, 2020. **Prêmio de menção honrosa**.

[8] Gabriel Costa (CEFET/RJ), Thiago Teixeira (LNCC), Frederico Cabral (LNCC), Carla Osthoff (LNCC). Implementação de overthead no método numérico HOPMOC através de um algoritmo híbrido MPI/OpenMP .Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho (WSCAD 2020 - WIC), 2020. Anais do Workshop de Iniciação Científica em Arquitetura de Computadores e Computação de Alto Desempenho, 2020.

[9] Stiw Herrera, Weber Ribeiro, Tiago Teixeira, André Carneiro, Frederico Cabral, Marcio Borges, Carla Osthoff. Avaliação de Desempenho no Supercomputador SDumont de uma Estratégia de Decomposição de Domínio usando as Funcionalidades de Mapeamento Topológico do MPI para um Método Numérico de Escoamento de Fluidos. Anais da Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro (ERAD-RJ), 2020.

[10] Guilherme Freire, Kary Ocanã, Micaela Coelho, Carla Osthoff. Exploração de Módulos Paralelo Híbrido de Bioinformática para Ambientes GPU de Supercomputação. Fórum de Iniciação Científica. Anais da Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro (ERAD-RJ), 2020.

[11] Lucas Cruz, Micaela Coelho, Luiz Gadelha, Kary Ocanã, Carla Osthoff. Desempenho de Workflows Multithreading no Supercomputador SDumont em Experimentos de RNA-Seq. Fórum de Iniciação Científica. Anais da Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro (ERAD-RJ), 2020.

[12] André Ramos Carneiro, Jean Luca Bez, Carla Osthoff, Lucas Mello Schnorr, Philippe O. A. Navaux. Lustre Filesystem Impact on Supercomputers: The SDumont Experience. Artigo submetido para o evento Parallel, Distributed, and Network-Based Processing (PDP2021).

[13] Carla Osthoff, Stiw Herrera, Thiago Teixeira, Micaella Coelho, Mateus Melo, Gabriel Costa, Frederico Cabral, Maria E. Welter Bruno Fagundes, André Carneiro, Roberto Souto, Lucas Cruz Guilherme Freire, Luiz Gadelha, Kary Ocanã. A ARQUITETURA DO SUPERCOMPUTADOR SDUMONT E OS DESAFIOS DA PESQUISA BRASILEIRA NA AREA DE COMPUTACAO DE ALTO DESEMPENHO. Artigo convidado para os anais da Escola Regional de Computação de Alto Desempenho de São Paulo (ERAD-SP) 2020.

#### 4.4. Relatórios Técnicos

[14] Welter M.E.S., Souto R.P., Osthoff C., Borseti R., and Melo M.S. Description and evaluation of the chemistry and the Rosenbrock scheme of the numerical and environmental prediction model BRAMS. Relatório Técnico LNCC 2020.

[15] Thiago Daniel Quimas Simões Teixeira. **Orientador:** Carla Osthoff Ferreira de Barros e Marcio Rentes Borges. OPORTUNIDADES DE OTIMIZAÇÃO EM MÉTODOS NUMÉRICOS PARA O ESCOAMENTOS BIFÁSICO EM MEIOS POROSOS HETEROGÊNEOS EM AMBIENTES COMPUTACIONAIS DE ALTO DESEMPENHO. Nível de bolsa: PCI-DD. PROGRAMA DE BOLSAS PCI/LNCC. Relatório Final de Atividades.

[16] Micaella Coelho Valente de Paula. **Orientador:** Carla Osthoff Ferreira de Barros e Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot. Avaliação de Desempenho dos Recursos Computacionais do Supercomputador Santos Dumont no Apoio a Execução Eficiente de Experimentos Científicos em Larga Escala. Nível de bolsa: PCI-DD. PROGRAMA DE BOLSAS PCI/LNCC. Relatório Final de Atividades.

#### 4.5. Participação em Eventos Científicos

##### **Organização do evento:**

Carla Osthoff: Organização do evento Internacional Latin American High Performance Computing (CARLA 2020 ) e do Workshop Women in HPC from the conference Latin American High Performance Computing (LA-WHPC 2020).

Roberto Pinto Souto: Participação no Comitê Executivo do HACKCOVID19, hackathon online que teve como objetivo criar tecnologias para ajudar a enfrentar os desafios da covid-1. Participação na Coordenação dos Minicursos da VI Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro (ERAD-RJ 2020-UFRRJ).

##### **Membro de comitê de programa nos periódicos:**

Carla osthoff

- Computer Physics Communications
- Journal of Supercomputing,
- Journal Cloud Computing and Data Science
- Journal of Advances in Applied & computational Mathematics

##### **Membro e, comitê de programa nos eventos científicos:**

Carla Osthoff:

- International Conference in Supercomputing (ICS2020)
- International Conference on Machine Learning Techniques and NLP (MLNLP 2020)
- Internacional Latin American in High Performance Computing Conference (CARLA 2020),
- Simpósio de Sistemas Computacionais de Alto Desempenho (WSCAD 2020)
- Simpósio Brasileiro de Arquiteturas de Computadores-Processamento de Alto Desempenho (SBAC-PAD2020)
- Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro (ERAD-RJ 2020)
- Conferência Ibero-Americana Computação Aplicada (CIACA 2020), 22nd International Conference on Enterprise Information Systems (ICEIS2020).

#### 4.6. Palestras à Convite

Carla Osthoff:

- Palestra "O Supercomputador SDumont, sua infra-estrutura e as pesquisas nas áreas de computação científica e Inteligência Artificial " , Semana Nacional de Ciência e Tecnologia 2020. (MCTI)
- Palestra: O Supercomputador SDumont e a inserção da Comunidade Acadêmica Brasileira na Produção Internacional de Pesquisa de Ponta. "Na Semana de Computação (UNFESP/SP)

- Palestra: " O Supercomputador Santos Dumont e os desafios para a computação de Alto Desempenho no Brasil." Escola Regional de Alto Desempenho de São Paulo. (ERAD-SP 2020).
- Palestra. " As Pesquisas em computação Exaflópica e a arquitetura do Supercomputador Santos Dumont. ". Escola Regional de Alto Desempenho do Rio de Janeiro. (ERAD-RJ 2020).
- Palestra: " O Supercomputador SDumont e sua importância como ferramenta de Computação de Alto Desempenho para o desenvolvimento e Aplicações e de Softwares da pesquisa de ponta no Brasil." Ciclos de seminários IC/UFF 2020
- Roberto Pinto Souto:
- Palestra: "Sistemas computacionais para aprendizado de máquina e Inteligência Artificial". 17ª Semana Nacional de Ciência e Tecnologia (SNCT 2020-LNCC).

#### **4.7. Desenvolvimento de Programas e Produtos**

Participação na elaboração do projeto de E-SCIENCE, que terá como objetivo atender a comunidade científica brasileira, sendo desenvolvido em colaboração com a RNP e o CBPF.

### **5. Impactos da pesquisa na sociedade**

Os trabalhos desenvolvidos pelo grupo de Processamento de Alto Desempenho tem como objetivo diminuir o tempo de execução de códigos executados no Supercomputador SDumont e em plataformas de Computação de Alto Desempenho em geral, trazendo como impacto uma utilização mais eficiente dos recursos computacionais e diminuindo os custos para a sua execução. Além disso, o grupo de PAD tem como prioridade a geração de recursos humanos em Computação de Alto Desempenho gerando impacto importante para o desenvolvimentos das Aplicações e dos Software de Alto Desempenho, que são fundamentais para o desenvolvimento científico e tecnológico da nossa sociedade.

### **6. Atividades Projetadas para 2021**

Dar continuidade aos projetos de pesquisa listados acima, no item 1.2 e dar continuidade a formação de recursos humanos em Computação de Alto Desempenho.

Dar início a estudos relacionados com Alto Desempenho em aplicações de Inteligência Artificial sob a orientação dos novos pesquisadores Diego Carvalho e Douglas Cardoso.

Devemos iniciar um projeto de colaboração com o grupo LINEA para fornecer assistência em computação de alto desempenho para aumentar a eficiência e diminuir o tempo de execução de aplicações do LINEA em ambientes de Computação de Alto Desempenho.

Devemos iniciar, em conjunto com a RNP, um projeto de assistência de computação de alto desempenho para os pesquisadores da EMBRAPA, dentro do âmbito deste projeto pretendemos desenvolver ferramentas para serem utilizadas por um portal inteligente, para submeter os jobs no SDumont de forma a alocar os recursos computacionais de forma eficiente, em colaboração com o grupo de pesquisa em dinâmica molecular do LNCC.



# MDA

METAHEURÍSTICAS: DESENHO E APLICAÇÕES



***Helio J.C. Barbosa***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

Estudo geral de metaheurísticas tanto do ponto de vista de desenho e implementação quanto de sua aplicação em problemas de otimização multi-nível e multi-objetivo.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Laurent E. Dardenne (COMOD)
- Fábio Lima Custódio (COMOD)

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

- Pós-Doutores: Jaqueline da Silva Angelo, Isabella Alvim Guedes
- Doutorandos: Igor Lucas S. Russo, Celio Henrique Nogueira Larcher Jr, Thiago Tavares Magalhães, Vinicius Kreischer de Almeida

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:

Alex B. Vieira (UFJF), Camila Silva de Magalhães (UFRRJ), Douglas Adriano Augusto (FIOCRUZ), Eduardo Krempser da Silva (FIOCRUZ), Heder Soares Bernardino (UFJF), Itamar L. de Oliveira (UFJF),.

- Internacionais:

Amanda Sabatini Dufek (Lawrence Berkeley National Laboratory)

## **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

Lista de temas de pesquisa desenvolvidas pelo grupo, incluindo título e pequena descrição (2 ou 3 linhas)

- Metaheurísticas, Metamodelos e Computação Paralela para Otimização Multinível e Multiobjetivo
- Inferência de Modelos Através de Programação Genética Gramatical para a Simulação Dinâmica Determinística de Redes Bioquímicas

## **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação  
“Computação Evolucionista” no PPG em Modelagem Computacional da UFJF.
- Mini-cursos / Escolas / Congressos  
“Mini-Symposium on Computational Intelligence Techniques for Optimization and Data Modeling”, Congresso Ibero-Latino-Americano de Métodos Computacionais em Engenharia (CILAMCE) 2020.  
Barbosa, Helio. J.C. & Ebecken, Nelson F.F.

## **2. Projetos de Pesquisa**

### **2.1. Metaheurísticas, Metamodelos e Computação Paralela para Otimização Multinível e Multiobjetivo**

Bolsa de Produtividade CNPq (1C) vigente.

### **2.2. Inferência de Modelos Através de Programação Genética Gramatical para a Simulação Dinâmica Determinística de Redes Bioquímicas**

Projeto de pesquisa FAPEMIG; encerrado.

## **3. Resultados Científicos e Tecnológicos**

### **3.1. Artigos Científicos em Periódicos**

Sempublicações em periódicos no período.

### **3.2. Livros e Capítulos de Livros**

- Queiroz A.C.L.C., Bernardino H.S., Vieira A.B., Barbosa H.J.C. (2020) Solving Multi-Agent Pickup and Delivery Problems Using a Genetic Algorithm. In: Cerri R., Prati R.C. (eds) Intelligent Systems. BRACIS 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12320, p. 140-153. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-61380-8\\_10](https://doi.org/10.1007/978-3-030-61380-8_10).
- Campos R.S., Silva J.G.R., Barbosa H.J.C., Santos R.W.. (2020) Electrotonic Effect on Action Potential Dispersion with Cellular Automata. In: Gervasi O. et al. (eds) Computational Science and Its Applications – ICCSA 2020. ICCSA 2020. Lecture Notes in Computer Science, vol 12249, p.205-215. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4\\_15](https://doi.org/10.1007/978-3-030-58799-4_15).

### **3.3. Artigos em Anais de Eventos**

- J. E. H. da Silva, H. S. Bernardino, H. J. C. Barbosa, A. B. Vieira, L. C. D. Campos, I. L. de Oliveira, "Inferring Gene Regulatory Network Models from Time-Series Data Using Metaheuristics," *2020 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, Glasgow, United Kingdom, 2020, pp. 1-8, doi: 10.1109/CEC48606.2020.9185572.
- T. T. Magalhães and B. Helio J. C., "Parallel Differential Evolution Algorithms for Stackelberg-Nash Bilevel Optimization Problems," *2020 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*, Glasgow, United Kingdom, 2020, pp. 1-8, doi: 10.1109/CEC48606.2020.9185813.

### **3.4. Participação em Eventos Científicos**

Vide item anterior.

### **3.5. Palestra à Convite**

Nenhuma palestra proferida no período.

### **3.6. Desenvolvimento de Programas e Produtos**

Nenhum registro ou patente no período.

### **3.7. Dissertações e Teses Defendidas**

Nenhuma tese concluída no período.

### **4. Atividades Projetadas para 2021**

Nenhuma. Aposentadoria prevista para o início de 2021. Apenas atividades dos atuais orientandos de doutorado em andamento.



# DEXL

DATAEXTREME LAB



***Fabio Porto***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O DEXL DataExtreme Lab, é o grupo de pesquisa do LNCC interessado em técnicas, metodologias e algoritmos para o processamento, análise e modelagem de grandes volumes de dados. O grupo tem desenvolvido suas atividades em torno principalmente das linhas de pesquisa: BigData, Inteligência Artificial, Ciência de Redes e Workflows Científicos. O trabalho desenvolvido pelo grupo, tem como motivação problemas reais identificados por parceiros em institutos de pesquisa e em empresas, transformando problemas práticos em novos desafios científicos e tecnológicos. Neste sentido, o grupo de pesquisadores se une à colaboradores nacionais e internacionais, além de contar com um grupo grande de alunos em todos os níveis de formação. Seja no apoio científico e tecnológico fornecido a seus parceiros, seja na formação de recursos humanos, oDEXL cumpre seu papel de retornar resultados para a sociedade.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

Artur Ziviani (COMAC)

Fabio Porto (COMAC)

Luiz Gadelha Jr (COMAC)

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

##### Pós-Doutores:

- Yania M. Souto (LNCC)
- Douglas Ericson de Oliveria (UFF)
- Felipe S. Abraão (LNCC)
- Klaus Wehmuth (LNCC)

##### Doutorandos:

- Anderson Chaves da Silva (LNCC)
- Caroline de Oliveira Costa Souza Rosa (LNCC)
- Claudio Tenório de Barros (LNCC)
- Daniel Ramos Silva (LNCC)
- Diego Braga Santi (UTFPR), co-orientação
- Diogo Pereira da Silva Santos (LNCC)
- Haron Fantecetele (LNCC)
- Júlio Cesar Borges da Silveira Nardellij (UTFPR), co-orientação
- Maria Luiza Modelli (LNCC)
- Mateus Ribeiro F de Mendonça (LNCC)
- Rebecca Salles (CEFET-RJ), co-orientação
- Rocio Zorilla Milagros Coz (LNCC)
- Yasmmin C. Martins (LNCC), co-orientação com A.T.R. Vasconcelos (defesa em 2020)

##### Mestrandos:

- Carmen Bonifácio (LNCC)
- Henrique Mateus F. da Silva (LNCC)

- Nathália Barbosa Santos (LNCC)
- Rafael Silva Pereira (LNCC) (defendido em 2020)
- Rafaela Nascimento (CEFET-RJ) (defendido em 2020)
- Thiago Moeda (LNCC)
- Victor de Paula Dornellas Ribeiro (LNCC)
- Viviane de Matos Matioli (LNCC)

IC:

- Raquel Gritz (FAETEC) (defendido em 2020)
- Lucas Cruz (CEFET-RJ – Campus de Petrópolis)
- André Demori (FAETEC) (Terminado em 2020)

### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

Nacionais:

- Alex Borges Vieira (UFJF)
- Eduardo Ogasawara (CEFET-RJ)
- Eduardo Bezerra (CEFET-RJ)
- Flavia Delicato (UFF)
- Leobino Sampaio (UFBA)
- Marcel Pedroso (FIOCRUZ)
- Marinez de Siqueira (JBRJ)
- Manoel Barral (FIOCRUZ)
- Paulo Figueiredo Pires (UFF)

Internacionais:

- Aline Viana (INRIA), França
- Andrew Townsend-Peterson (UKansas), USA
- Ben Chin Ooi (NUS), Cingapura
- Birgitta König-Ries (FSU Jena), Alemanha
- Christoph Steinbeck (FSU Jena), Alemanha
- Dennis Shasha (NYU), USA
- Florin Rusu (UCMec), USA
- Hector Zenil (University of Oxford), Reino Unido
- Patrick Valduriez (INRIA), França

## 2. Pesquisa e Desenvolvimento

### Tema 1: Bancos de Dados e Big Data

- A disponibilização crescente de dados exige o desenvolvimento de novas técnicas, metodologias e algoritmos para o processamento e análise de dados. Temos atuado nas áreas de: saúde, astronomia e simulação numérica. O sistema SAVIME foi desenvolvido sob este tópico de pesquisa;

Tema 2: Inteligência Artificial. Temos atuado nas seguintes frentes: (a) aplicação de algoritmos de IA para problemas em diversas áreas; (b) desenvolvimento de novas técnicas de IA; (c) desenvolvimento de sistema de apoio ao desenvolvimento de modelos de aprendizagem. Quanto ao item (b), temos investigado os seguintes problemas:

- Aprendizado com poucos dados;
- Resolução de consultas preditivas espaço-temporais;
- Arquitetura de redes profundas para predição espaço-temporal;
- Detecção de anomalias em séries-temporais;
- Processamento de linguagem natural;

Tema 3: Ciência de Redes. Temos atuado na modelagem e análise de redes complexas, incluindo estudos teóricos sobre (i) propriedades fundamentais de redes complexas; (ii) algoritmos e métodos para análise de redes complexas; (iii) interação da área de redes complexas e aprendizado de máquina; e (iv) aplicações interdisciplinares de modelagem e análise de redes, em áreas como cidades inteligentes, biodiversidade, saúde pública, Internet, entre outros.

Tema 4: Gerência de Dados Científicos e Reprodutibilidade. Desenvolver metodologias, técnicas e ferramentas para a gerência das diversas etapas do ciclo de vida de dados científicos. É enfatizada a gerência de workflows científicos para a etapa de análise desses dados, visando propriedades como reprodutibilidade, escalabilidade e conformidade com os princípios FAIR<sup>1</sup> (Findability, Accessibility, Interoperability, and Reuse).

---

<sup>1</sup> <https://www.go-fair.org/fair-principles/>

### **3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

Disciplinas em programas de Pós-Graduação

- GA009 – Banco de Dados
- GA-54 – Ciência de Redes

Mini-cursos / Escolas / Congressos

- Jornada em Ciência de Dados, Programa de Verão LNCC
  - Algoritmos e Modelos de Programação para Big Data
  - Ciência de Redes
- Jornada de e-Biodiversidade, Programa de Verão do LNCC
  - Modelagem de Nichos Ecológicos
- Simpósio Brasileiro de Banco de Dados
  - Coordenador de Programa
  - Coordenador do Comitê Diretivo
- HackCovid19
  - Membro do Comitê de Organização
- Simpósio Brasileiro de Computação Aplicada à Saúde (SBCAS)
  - Coordenador do Workshop de Ferramentas e Aplicações (WFA)
- IEEE International Smart Cities Conference (ISC2 2020)
  - Publications Co-Chair
- Mini-curso
  - Aprendizado de Máquina Aplicados a Grafos de Conhecimento;

### **4. Projetos de Pesquisa**

#### **4.1. Projeto 1**

Título: Desenvolvimento de Plataforma de Inteligência Computacional

Descrição: O projeto objetiva investigar o ciclo de vida de modelos de aprendizado de máquina e desenvolver um sistema de gerência que apoie a construção de modelos.

Vigência: Setembro de 2018 à Junho de 2021

Financiamento: Petrobras/ANP

Valor: R\$ 6.955.550,82.

#### **4.2. Projeto 2**

Título: High Performance Data Science

Descrição: Projeto de pesquisa em colaboração Internacional, Brazil – INRIA. Formação de Time Associado. Explorar técnicas de ciência de dados, utilizando computação de alto desempenho.

Vigência: Janeiro de 2020 à Dezembro de 2022

Financiador: INRIA

Valor: 45.000 euros

#### **4.3. Projeto 3**

Título: Gypscie – Transformando Dados em Conhecimento

Descrição: Projeto de bolsa de produtividade em pesquisa. Objetivo do projeto é explorar técnicas de inteligência artificial aplicadas à áreas da ciência e de na melhoria do desempenho de sistemas.

Vigência: Julho de 2018 à Junho de 2021 Financiador:

CNPq

Valor: R\$ 39.600,00

#### **4.4. Projeto 4**

Título: Data Science for Weather and Climate Sciences

Descrição: Projeto de colaboração internacional entre o LNCC e a Universidade da Dinamarca. Objetivo do projeto é desenvolver técnicas de inteligência artificial aplicadas à áreas de meteorologia e mudanças climáticas. Em especial, estamos interessados em desenvolver modelos espaço-temporais que sejam atualizados por informações capturadas por sensores.

Vigência: Julho de 2018 à Junho de 2021

Financiador: Agência Dinamarquesa para Ciência e Educação Superior Valor:

DKK 287.940,00

#### **4.5. Projeto 5**

Título: CReTA: Ciência de Redes: Teoria e Aplicações

Descrição: Projeto de bolsa de produtividade em pesquisa. Prevê atividades de pesquisa, desenvolvimento e inovação nas áreas de redes complexas, em particular a investigação das naturezas (i) quantitativa e matemática; (ii) empírica e orientada a dados; (iii) computacional; e (iv) interdisciplinar; da área de ciência de redes.

Vigência: Março de 2020 a Fevereiro de 2024

Financiador: CNPq

Valor: R\$ 48.000,00

#### 4.6. Projeto 6

Título: Ciência de Redes em Ciência de Dados: Teoria e Aplicações

Descrição: Projeto do Programa Cientista do Nosso Estado da FAPERJ. Este projeto visa a investigação de diferentes aspectos, da teoria a aplicações, da área recentemente chamada de Ciência de Redes, inserida em um contexto mais amplo de Ciência de Dados. Os objetivos gerais do projeto são a pesquisa básica e aplicada em ciência de redes, incluindo pesquisa interdisciplinar com diferentes áreas do conhecimento, a formação de recursos humanos e a transferência de conhecimento tanto para a sociedade quanto para outras instituições. São definidos os seguinte quatro objetivos específicos de pesquisa referentes a aspectos complementares (com alguma sobreposição entre si) com os quais pretende-se atuar em ciência de redes: Investigar as naturezas (i) quantitativa e matemática; (ii) empírica e orientada a dados; (iii) computacional; e (iv) interdisciplinar; da área de ciência de redes.

Vigência: Março de 2018 a Junho de 2021

Financiador: FAPERJ

Valor: R\$ 100.800,00

#### 4.7. Projeto 7

Título: INECiD: Internet e a Nova Era de Ciência de Dados

Descrição: O projeto INECiD apresenta duas vertentes principais. A primeira delas, inclui a caracterização do comportamento de usuários e carga de trabalho que impactarão o futuro da Internet. A segunda vertente de pesquisa trata da criação de ferramentas de suporte a sistemas baseados em grandes volumes de dados a partir de um único objeto matemático, de forma a permitir uma modelagem integrada de tais sistemas, simplificando a análise de objetos de larga escala. Este projeto envolve as seguintes instituições: LNCC e UFJF.

Vigência: Outubro de 2017 a Setembro de 2020

Financiador: FAPESP, MCTI e CGI.br

Valor: R\$ 144.812,80

### 5. Destaques Científicos e Tecnológicos

#### 5.1. Entre a Teoria e Prática no Desenvolvimento de Modelos de Inteligência Artificial

O destaque científico e tecnológico identificado nesta seção refere-se ao projeto Gypscie, em desenvolvimento no contexto de projeto de P&D com a Petrobras. O projeto iniciou-se com o foco na investigação de técnicas e metodologias que permitam o compartilhamento e integração entre modelos baseados em aprendizagem e os dados associados. Partiu-se do princípio de que um sistemas de gerência de modelos deve oferecer algumas funções básicas associadas ao ciclo de vida de modelos e dados. A partir do apoio à construção de modelos, novas funcionalidade aparecem como relevantes: Explicar as predições de um modelo; Fornecer mecanismos de Proveniência de modelos; Selecionar automaticamente modelos competitivos para uma tarefa de predição. Enquanto a funcionalidade essencial de apoio ao ciclo de vida de modelos foi implementada na primeira versão do sistema Gypscie [1], avançamos em técnicas para a

composição automática de modelos espaço-temporais. Para isso desenvolvemos a estratégia DJEnsemble [2]. Esta última considera o problema definido sobre um Domínio de aplicação Espaço-temporal, como por exemplo, a predição de temperatura ou volume de chuva. Neste contexto, a estratégia DJEnsemble define um conjunto de técnicas que minimiza o erro de predição e o custo de avaliação de uma consulta preditiva espaço-temporal, na presença de modelos preditivos competitivos (i.e. que realizem a predição da mesma quantidade) . Dois princípios fundamentais são adotados neste trabalho: (i) a definição de um critério de alocação espacial de modelos preditivos e (2) um método de escolha de modelos baseado na distribuição de dados.

A Figura 1, apresenta os principais componentes da proposta da estratégia DJEnsemble, enquanto os detalhes da técnica podem ser acessados no *preprint* [2].

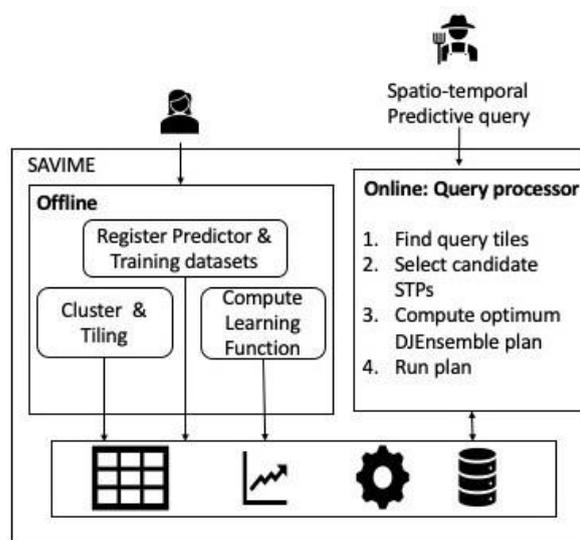


Figura 1 Arquitetura da abordagem DJEnsemble

O componente DJEnsemble está planejado para ser implementado no sistema Gypscie. Mais detalhes sobre o sistema podem ser obtidos no endereço: <http://dexl.Incc.br/gypscie/>.

## 5.2. Investigações na luta contra o COVID-19

Em 2020, o mundo se viu frente a uma pandemia causada pelo vírus SARS-COV-2, responsável pela doença que passou a ser conhecida pela sigla COVID-19. Assim que determinou-se o confinamento no Brasil, nosso grupo iniciou um trabalho de uso da ciência de dados no apoio à luta contra a pandemia. Nosso primeiro resultado [3], publicado em *preprint* em Abril de 2020, objetivou prever o colapso do sistema de saúde nos estados brasileiros caso um modelo de relaxamento das políticas de confinamento da população fosse adotado. Para isso, utilizamos dados disponíveis naquele momento sobre a difusão da infecção em três países, onde a epidemia havia sido identificado com alguns meses a frente da que ocorria em nosso país. A partir de um modelo matemático simples indicativo da necessidade de leitos hospitalares para tratar de doentes em caso de internação, e os modelos de expansão da doença fornecida pelos dados dos três países, projetamos o desenrolar da doença em cada estado.

Considerando a quantidade de leitos hospitalares disponíveis por estado, informado pelo sistema do Ministério da saúde pudemos determinar o dia que, tomadas as medidas de relaxamento do confinamento social, cada estado entraria em colapso de seu sistema de hospitais.

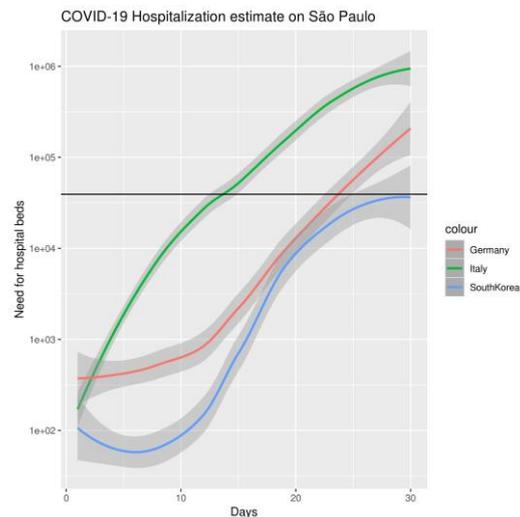


Figura 2 Projeção do colapso hospitalar em São Paulo

Ainda no contexto da pandemia do SARS-COV-2, desenvolvemos alguns modelos de predição de casos de infecção a partir da detecção de fragmentos de RNA do vírus, no esgoto de cidades. Ocorre que está sendo desenvolvido um projeto de pesquisa entre a Prefeitura de Niterói e o Laboratório de Virologia da FIOCRUZ, no Rio de Janeiro, em que coletas do esgoto em algumas regiões da cidade de Niterói são processadas pelo laboratório da FIOCRUZ e a quantidade de fragmentos encontrada é publicada em dados públicos da prefeitura. A partir desses dados e de modelos de aprendizado de máquina, trabalhamos na predição do número de infectados por região da cidade. Dadas as características de aparecimento de vestígios dos fragmentos, a técnica proposta pode servir como anúncio do desenvolvimento da infecção, uma vez que seus sinais aparecem em até duas semanas antes da percepção normal da doença a partir de testes em pessoas que tenham desenvolvido a doença, permitindo uma ação prematura dos órgãos públicos.

Finalmente, na parceria com a FIOCRUZ/ICICT, na qual desenvolvemos a Plataforma de Ciência de Dados para Saúde (PCDaS-<https://bigdata.icict.fiocruz.br/>), adicionamos um componente completo de informações sobre o avanço da pandemia nos estados brasileiros.

### 5.3. Destaque 3

Artur Ziviani listado em um grupo de IEEE Impact Creators:  
<https://transmitter.ieee.org/author/artur/>

## 6. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 6.1. Artigos Científicos em Periódicos

- BARONI, L. ; SALLES, REBECCA ; SALLES, S. ; GUEDES, G. ; PORTO, FABIO ; BEZERRA, E. ; BARCELLOS, C. ; PEDROSO, M. ; Ogasawara, E. . An Analysis of Malaria in the Brazilian Legal Amazon Using Divergent Association Rules. JOURNAL OF BIOMEDICAL INFORMATICS, v. 109, p. 1, 2020.
- LEMUS, NOEL MORENO ; SOUTO, Y. M. ; PEREIRA, R. S. ; LIU, J. ; PACITTI, Esther ; VALDURIEZ, Patrick ; PORTO, FABIO . {SUQ2:} Uncertainty Quantification Queries over Large Spatio-temporal Simulations. Bulletin of the Technical Committee on Data Engineering, v. 43, p. 47, 2020.
- OCAÑA, KARYA.C.S. ; GALHEIGO, MARCELO ; OSTHOFF, CARLA ; GADELHA, LUIZ M.R. ; PORTO, FABIO ; GOMES, ANTÔNIO TADEU A. ; DE OLIVEIRA, DANIEL ; VASCONCELOS, ANA TEREZA . BioinfoPortal: A scientific gateway for integrating bioinformatics applications on the Brazilian national high-performance computing network. Future Generation Computer Systems , v. 107, p. 192-214, 2020.
- CASTRO, RAFAELA ; SOUTO, YANIAM. ; Ogasawara, Eduardo ; PORTO, FABIO ; BEZERRA, EDUARDO . STConvS2S: Spatiotemporal Convolutional Sequence to Sequence Network for Weather Forecasting. NEUROCOMPUTING , v. 422, p. 1, 2020.
- CHIESSE, R. ; FIGUEIREDO, D. R. ; ROCHA, A. A. A. ; ZIVIANI, A. . Efficient Network Seeding under Variable Node Cost and Limited Budget for Social Networks. INFORMATION SCIENCES, v. 514, p. 369-384, 2020.
- SIRACUSA, P. C. ; GADELHA JUNIOR, L. M. R. ; ZIVIANI, A. . New perspectives on analysing data from biological collections based on social network analytics. Scientific Reports , v. 10, p. 3358, 2020.
- CARNIVALI, G. S. ; VIEIRA, A. B. ; ESQUEF, P. A. A. ; ZIVIANI, A. . CoVeC: Coarse-Grained Vertex Clustering for Efficient Community Detection in Sparse Complex Networks. INFORMATION SCIENCES, v. 522, p. 180-192, 2020.
- TENTORI, MONICA ; Ziviani, Artur ; MUCHALUAT-SAADE, DÉBORA C. ; FAVELA, JESUS . Digital healthcare in Latin America. COMMUNICATIONS OF THE ACM, v. 63, p. 72-77, 2020.

#### Artigos aceitos para publicação em 2020:

- OLIVEIRA, A. T. ; MARTINS, B. J. ; MORENO, M. F. ; VIEIRA, A. B. ; GOMES, A. T. A. ; ZIVIANI, A. . SDN-Based Architecture for Providing Quality of Service to High Performance Distributed Applications. International Journal of Network Management , 2020.
- GADELHA JUNIOR, L. M. R. ; SIRACUSA, P. C. ; DALCIN, E. C. ; SILVA, L. E. ; AUGUSTO, D. A. ; KREMPSE, E. ; AFFE, H. M. ; COSTA, R. L. ; MONDELLI, M. L. B. ; MEIRELLES, P. M. ; THOMPSON, F. ; CHAME, M. ; ZIVIANI, A. ; SIQUEIRA, M. F. . A survey of biodiversity informatics: Concepts, practices, and challenges. WIRES DATA MINING AND KNOWLEDGE DISCOVERY, 2020.
- MASCARENHAS, J. G. Z. ; ZIVIANI, A. ; WEHMUTH, KLAUS ; VIEIRA, A. . On the Transaction Dynamics of the Ethereum-based Cryptocurrency. Journal of Complex Networks, 2020.

- VIANA, A. C. ; COSTA, R. ; ZIVIANI, A. ; SAMPAIO, L. N. . Tactful Networking: Humans in the communication loop. IEEE Transactions on Emerging Topics in Computational Intelligence (TETCI), 2020.
- MENDONCA, M. R. F. ; BARRETO, A. M. S. ; ZIVIANI, A. . Approximating Network Centrality Measures Using Node Embedding and Machine Learning. IEEE Transactions on Network Science and Engineering (TNSE), 2020.
- WEHMUTH, K. ; ZIVIANI, A. ; COSTA, L. C. ; SILVA, A. P. C. ; VIEIRA, A. B. . You Shall not Pass: Avoiding Spurious Paths in Shortest-Path Based Centralities in Multidimensional Complex Networks. IEEE Transactions on Network Science and Engineering (TNSE), 2020.

## 6.2. Livros e Capítulos de Livros

- ABRAHAO, F. S. ; D'OTTAVIANO, I. M. L. ; WEHMUTH, K. ; DORIA, F. A. ; ZIVIANI, A. . Learning the Undecidable from Networked Systems. In: Shyam Wuppuluri; Francisco Antonio Doria. (Org.). Unravelling Complexity: The Life and Work of Gregory Chaitin. 1ed.Singapura: World Scientific, 2020, v. , p. 131- 180.

## 6.3. Artigos em Anais de Eventos

- COSTA, R. ; VIANA, A. C. ; ZIVIANI, A. ; SAMPAIO, L. N. . Towards Human-Aware D2D Communication. In: 2nd International Workshop on Urban Computing (UrbCom), IEEE DCOSS, 2020, Marina del Rey, CA, EUA. Proc. of the 2nd International Workshop on Urban Computing (UrbCom), IEEE DCOSS, 2020.
- SILVA, M. A. ; SANTOS, N. B. ; ROSA, C. O. C. S. ; OLIVEIRA, R. M. ; SANTOS, M. ; ITO, M. ; VIEIRA, A. B. ; ZIVIANI, A. . Análise dos Atendimentos de Gestantes na Rede de Atenção Básica de Saúde no Município de São Paulo. In: XX Simpósio Brasileiro de Computação Aplicada à Saúde (SBCAS 2020), 2020, Salvador, BA. Anais do XX Simpósio Brasileiro de Computação Aplicada à Saúde (SBCAS 2020). Porto Alegre: SBC, 2020.
- SALLES, R. ; ESCOBAR, L. ; BARONI, L. ; ZORRILLA, R. ; ZIVIANI, A. ; KREISCHER, V. ; DELICATO, F. C. ; PIRES, P. ; MAIA, L. ; COUTINHO, R. ; ASSIS, L. ; OGASAWARA, E. . Harbinger: Um framework para detecção de eventos em séries temporais. In: XXXV Simpósio Brasileiro de Banco de Dados - SBBD'2020, 2020. Anais do XXXV Simpósio Brasileiro de Banco de Dados - SBBD'2020, 2020.
- ABRAHAO, F. S. ; WEHMUTH, K. ; ZENIL, H. ; ZIVIANI, A. . An Algorithmic Information Distortion in Multidimensional Networks. In: The 9th International Conference on Complex Networks and their Applications (Complex Networks 2020), 2020, Madri, Espanha. Proceedings of the The 9th International Conference on Complex Networks and their Applications (Complex Networks 2020), 2020.
- COSTA, R. ; VIANA, A. C. ; ZIVIANI, A. ; SAMPAIO, L. N. . Extração e Análise de Dados Como Suporte a Estratégias de Comunicação D2D Cientes do Humano. In: XXXVIII Simpósio Brasileiro de Redes de Computadores e Sistemas Distribuídos (SBRC), 2020, Rio de Janeiro, RJ. Anais do XXXVIII Simpósio Brasileiro de Redes de Computadores e Sistemas Distribuídos (SBRC), 2020.

## 7. Palestras a Convite

- 4a Escola de Inverno – IC – UFF, *A Computação e a pesquisa aplicada no Combate ao COVID-19 no LNCC*, Fabio Porto
- I Encontro de IA e Aprendizado de Máquina na Indústria de Óleo & Gás 2020 - IEEE CIS - Gypscie: Um Ambiente para Gerência de Dados e Modelos de Aprendizado de Máquina, Fabio Porto,
- VIII Workshop da Escola de Informática & Computação -WEIC 2020 – CEFET-RJ, Painel Gerência de Modelos e Dados, Gypscie: Um Ambiente para Gerência de Dados e Modelos de Aprendizado de Máquina
- Associação Brasileira de geólogos de Petróleo, Gypscie – managing AI Models for the Oil and Gas Industry, Fabio Porto
- Ciclo de Seminários do IC/UFF, Gypscie: Um Ambiente para Gerência de Dados e Modelos de Aprendizado de Máquina, Fabio Porto
- Workshop em Computação Aplicada 2020, INPE, DJENSEMBLE – An Approach for The Automatic Selection of Black-Box Spatio-temporal Deep- Learning Models, Fabio Porto.
- Encontro com alunos de Engenharia, Universidade Católica de Petrópolis (UCP), Ciência de Redes em Ciência de Dados: Desafios e Oportunidades, Artur Ziviani
- Meet Up -- Grupo CiDAMO/UFPR, Ciência de Redes em Ciência de Dados: Desafios e Oportunidades, Artur Ziviani
- Seminário da Disciplina Design, Comportamento e Tecnologias Digitais, Programa de Pós-Graduação em Design da UFPR, Ciência de Redes em Ciência de Dados: Desafios e Oportunidades, Artur Ziviani
- Seminários da Área Interdisciplinar de Engenharia e Ciência Computacional, COPPE/UFRJ, Ciência de Redes em Ciência de Dados: Desafios e Oportunidades, Artur Ziviani
- Escola de Inverno da UFF, Excelência em Pesquisa em Computação, Artur Ziviani
- Seminário Científico STIC-AmSud, SafeCityMap: Mission Covid Inria, Artur Ziviani
- XVII Congresso Brasileiro de Informática em Saúde (CBIS 2020), Painel “Ciência de Dados aplicada à Saúde”, Artur Ziviani
- XXXVIII Simpósio Brasileiro de Redes de Computadores e Sistemas Distribuídos (SBRC 2020), Painel “Researching Outside the Box: O Papel da Interdisciplinaridade nas Pesquisas da Comunidade”, Artur Ziviani
- School on Systems and Networks (SSN 2020), UFES, Palestra “Time Centrality in Dynamic Complex Networks”, Artur Ziviani
- Ecological Niche Modeling 2020 Course, organizado por Andrew Townsend-Peterson (U.Kansas). Palestra “Scientific Workflows and Reproducibility in Ecological Niche Modeling”, Luiz Gadelha e Maria Luiza Mondelli

## 8. Desenvolvimento de Programas e Produtos

- Gypscie, Sistema para Gerenciamento de Dados e Modelos, sem registro, LNCC, UFF, CEFET-RJ, Petrobras

## 9. Dissertações e Teses Defendidas

### 9.1. Dissertações de Mestrado

- Rafael Silva Pereira. Strategies and Techniques for Deep Learning on Small Data. 2020. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Orientador: Fabio Andre Machado Porto.
- Rafaela de Castro do Nascimento. STCONVS2S: SPATIOTEMPORAL CONVOLUTIONAL SEQUENCE TO SEQUENCE NETWORK FOR WEATHER FORECASTING. 2020. Dissertação (Mestrado em Ciência da Computação) - Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca, . Coorientador: Fabio Andre Machado Porto.

### 9.2. Teses de Doutorado

- Hermano Lourenço Souza Lustosa. SAVIME:Enabling Declarative Array Processing In Memory. 2020. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Orientador: Fabio Andre Machado Porto.
- Yasmin Côrtes Martins. Predição de interações proteína-proteína por análise combinada de evidências. 2020. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. Coorientador: Artur Ziviani.

## 10. Impactos da pesquisa na sociedade

As atividades desenvolvidas em torno do combate ao COVID-19 foram sem dúvida as que mais contribuíram neste momento difícil em que o mundo enfrenta a pandemia. Tanto no ponto de vista de resultados refletidos em artigos científicos quanto no desenvolvimento da *Plataforma Monitora COVID-19* o grupo mostrou rápida reação em prol da pesquisa aplicada a um problema importante da sociedade.

## 11. Atividades Projetadas para 2021

- Avançar na investigação de dados+modelos+eventos-> Digital.Twin

O tema de gêmeos digitais tem recebido bastante atenção na Indústria. A partir da disponibilização de sensores monitorando em tempo-real o funcionamento de dispositivos e o estado do ambiente, modelos de predição e de detecção de anomalias são construídos e integrados em um contexto de sistemas de informação reproduzindo digitalmente o processo monitorado e permitindo a criação de cenários *what-if*. Este tema que é de alto interesse na Petrobras, será também relevante em outras indústrias. No entanto a concretização dessa visão requer pesquisa e desenvolvimento tecnológico. Esta atividade se caracteriza no contexto do desenvolvimento do sistema Gypscie.

- Desenvolver a linha de NLP

O processamento de linguagem natural é um tema de bastante interesse atualmente. Técnicas permitem a coleta de informações registradas de maneira informal em textos livres. Em particular, na área de saúde, textos livres aparecem em prontuários eletrônicos, bulas de remédios e artigos científicos. Nosso grupo ainda não havia se envolvido nessa tema o que acabou acontecendo com a parceria em um projeto na área de COVID-19 com a FIOCRUZ Brasília. A partir dessa oportunidade, que inclui bolsa para três alunos, capacitaremos o grupo nessa nova linha de investigação aplicando técnicas de Inteligência artificial, bancos de dados e ontologias.

- Desenvolver a linha de reprodutibilidade de experimentos

- Continuar as colaborações Internacionais

As colaborações Internacionais são de suma importância para que mantenhamos o alto nível de pesquisa e de resultados obtidos. A partir das cooperações internacionais oferecemos oportunidades de co-orientações de nossos alunos e mesmo de experiências em doutorado sanduiche. Pretendemos continuar a construir essas parcerias, com ênfase no INRIA, com quem o LNCC está estabelecendo um Laboratório Internacional.

- Estender as parcerias com indústria/institutos de pesquisa

Em 2020 houve um grande esforço na colaboração com a Petrobras. Infelizmente, as condições econômicas se mostraram desfavoráveis, prejudicando o desenvolvimento das tarefas conforme haviam sido planejadas. Neste ano, pretendemos estender parcerias para outros interlocutores. Já temos uma parceria estabelecida com a FIOCRUZ/ICICT mas também com outros grupos como o da Bahia, associado ao CIDACS. Temos também outras parcerias em curso de estabelecimento que devem gerar frutos em 2021.



# SCP

SEGURANÇA CIBERNÉTICA E PRIVACIDADE



***Fábio Borges de Oliveira***

RESPONSÁVEL

## RESUMO

O grupo SCP vem trabalhando na área interdisciplinar envolvendo Teoria da Computação, Matemática da Computação, Sistemas de Computação, Probabilidade e Estatística, e Matemática Aplicada com Álgebra, Matemática Discreta e Combinatória, especificamente com pesquisa em processamento sobre dados cifrados, geralmente conhecido como criptografia homomórfica. Além disto, tem se desenvolvido biblioteca para a linguagem Fortran com o objetivo de prover segurança e privacidade em processamento de mapas da Petrobras. Permitindo que os dados sensíveis sejam processados fora da empresa, sem basear a segurança e privacidade apenas em normatização da administração como a ISO 27000.

## 1.1. Grupo de Pesquisa

### 1.1. Equipe

#### 1.1.1. Pesquisadores

##### **Professor**

- Tecnologista
  1. Dr.-Ing. Fábio Borges de Oliveira (COTIC)

#### 1.1.2. Alunos e pós-Doutores

Neste período tivemos algumas saídas, grifamos os postos que perdemos.

- Pós-Doutores: **1 vaga em aberto**
  
- Doutorandos:
  1. Aline de Lurdes Zuliani Lunkes (LNCC - Brasil)
  2. Marcio Prudêncio Belleza (LNCC - Brasil)
  3. Murilo Coutinho Silva (UnB - Brasil)
  4. **Diogo Pereira da Silva Santos (LNCC - Brasil)**
  
- Mestrandos:
  1. Elaine Bernine (LNCC - Brasil)
  2. Paulo Ricardo Borré Reis (LNCC - Brasil)
  3. Thays Rocha Neri Ferreira (LNCC - Brasil)
  4. Matheus da Fonseca Dornelles (LNCC - Brasil)
  
- IC:
  1. **Daniel Veiga da Silva Antunes (CEFET - RJ)**
  2. **Ricardo Luiz Cerqueira Júnior (CEFET - RJ)**
  
- Outros Colaboradores:
  1. Matheus Aranha Silva
  2. **Yuri Gonçalves Miguel**

### 1.1.3. Pesquisadores Colaboradores

- Nacionais:

1. Antônio Lacerda Júnior (Inmetro)
2. Basílio de Bragança Pereira (UFRJ)
3. Rafael Timóteo de Sousa Jr (UnB)
4. \*Pedro Carlos da Silva Lara (CEFET - RJ)

\* Pedro está apenas honrando com os compromissos, ele não quer mais assumir novos compromissos no LNCC.

- Tema 1: Avaliação de Segurança  
Na última década, o Inmetro publicou diversos regulamentos metrológicos exigindo um nível alto de segurança da informação em instrumentos de medição. Vários dos requisitos contidos nesses regulamentos envolviam criptografia e assinatura digital, os quais foram baseados em normas do NIST. O nível atual de conhecimento aplicado já coloca o Brasil na vanguarda dentre os países da América Latina e na frente de vários países europeus.
- Tema 2: Criptografia e Criptoanálise  
Aprimoramento de algoritmos criptográficos e detecção de vulnerabilidades, incluindo Criptografia Pós-Quântica e Criptografia Homomórfica.
- Tema 3: IA Aplicada à Segurança e Privacidade  
Algoritmos de Inteligência Artificial (IA) têm se mostrado eficientes em diversas áreas de pesquisa, inclusive com aplicações em Segurança e Privacidade. Temos interesse em todas as relações de IA com Segurança e Privacidade. Em particular, redes neurais artificiais com dados cifrados.
- Tema 4: Computação Paralela e Distribuída  
Paralelização de algoritmos para sistemas computacionais de memória compartilhada e de memória distribuída, possibilitando o processamento dados e execução de protocolos de forma paralela e distribuída em hardwares com arquitetura heterogêneos.
- Tema 5: Privacidade  
Avaliação de complexidades, aplicações em cenários reais e otimização de algoritmos criptográficos capazes de computar sobre dados cifradas, usando criptografia homomórfica e DC-Nets. Além disso, usamos outras técnicas como secret sharing para proteger dados privados que pertençam a pessoas e instituições, mas que precisam ser manipulados por outrem sem que os dados sejam expostos.

### 1.2. Ensino e Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - Curvas Elípticas e Hiperelípticas
  - Criptografia
  - Criptografia Homomórfica
  - Tópicos Especiais em Modelagem Computacional: Programação em Criptografia
  - Ciência da Computação: Fundamentos

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Criptografia em Software de Modelagem Computacional Hidro-Geomecânica de Reservatórios

Desenvolvimento de metodologias para garantir segurança e privacidade à instituição detentora de informações relevantes para descrever reservatórios de óleo e gás que são processados em computadores fora da instituição.

A equipe de TIC da Petrobras entendeu equivocadamente que basta ter a ISO 27000 para o sistema ser seguro. A equipe do CENPES gostaria de continuar o projeto, mas o projeto perdeu prioridade e perdeu os recursos, devendo terminar em 2021.

### 2.2. Redes Neurais e Aplicações de Máquinas Estatísticas de Aprendizado

1) Preparo e submissão a CRC Editora o livro Neural Networks in Statistics and Data Science: An Introduction 2) Consultoria e colaboração estatística em aplicações de métodos de máquinas estatísticas de aprendizados em cardiologia em colaboração com o Instituto de Cardiologia Edson Saad da UFRJ. Bolsa de professor Emérito da FAPERJ até 30/06/2021.

## 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1. Best Paper

Através de um processo rigoroso de *double blind peer review*, recebemos o prêmio do SBSeg 2020 de Melhor Trabalho em Criptografia para o artigo: "Improving the Security of ChaCha against Differential-Linear Cryptanalysis"

**Abstract:** The stream cipher ChaCha has received a lot of attention and recently is being used as a new cipher suite in TLS 1.3, as a random number generator for operating systems (Linux, FreeBSD, OpenBSD, NetBSD, and DragonFly BSD), a proposed standardization in RFC 7634 for use IKE and IPsec, and by the WireGuard VPN protocol. Because of that, it is very important to understand and study the security of this algorithm. Previous works showed that it is possible to break up to 7 of the 20 rounds of ChaCha. In this paper, we show that a simple modification in the algorithm, namely changing the rotation distances in the Quarter Round Function, makes ChaCha more secure against all the most effective known attacks without any loss in performance. In fact, we show that with these changes, it is only possible to break up to 6 rounds of ChaCha. Therefore, it would be no longer possible to break 7 rounds of ChaCha with the best-known attacks.

### 3.2. Menção Honrosa

Através de um processo rigoroso de *double blind peer review*, recebemos a Menção Honrosa do SBSeg 2020 para Artigos Curtos com o trabalho: "Computação da Quadratura Gaussiana em um Esquema Criptográfico Parcialmente Homomórfico"

**Abstract:** There is a growing attention to the use of homomorphic encryption, that is, cryptographic systems able to perform mathematical operations with the data

in the encrypted domain. Although such systems provide a huge gain in terms of data privacy, they prove to be significantly slower. This work evaluates the applicability of the Paillier system in the calculation of Gaussian quadrature. A mean increase of 3234 times in the computational time was verified using the homomorphic system and nine decimal cases of precision.

## 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

1. Fábio Borges, Paulo Ricardo Reis e Diogo Pereira. «A Comparison of Security and its Performance for Key Agreements in Post-Quantum Cryptography». Em: *IEEE Access* 8 (2020), pp. 142413–142422. doi: 10.1109/ACCESS.2020.3013250. url: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.3013250>
2. Murilo Coutinho, Rafael Timóteo de Sousa Júnior e Fábio Borges. «Continuous Diffusion Analysis». Em: *IEEE Access* 8 (2020), pp. 123735–123745. doi: 10.1109/ACCESS.2020.3005504. url: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.3005504>

### 4.2. Livros e Capítulos de Livros

B. de Braganca Pereira, C.R. Rao e F. Borges de Oliveira. *Statistical Learning Using Neural Networks: A Guide for Statisticians and Data Scientists with Python*. Chapman e Hall/CRC, 2020. isbn: 9780429775550. doi: 10.1201/9780429431296. url: <https://doi.org/10.1201/9780429431296>

### 4.3. Artigos em Anais de Eventos

1. Murilo Coutinho, I. Passos, R. T. Souza JR. e Fábio Borges. «Improving the Security of ChaCha against Differential-Linear Cryptanalysis». Em: *XX Simpósio Brasileiro em Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (XX SBSEG 2020)*. Petrópolis - RJ, 2020
2. Paulo Ricardo Reis, Pedro Lara e Fábio Borges. «Computação da Quadratura Gaussiana em um Esquema Criptográfico Parcialmente Homomórfico». Em: *XX Simpósio Brasileiro em Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (XX SBSEG 2020)*. Petrópolis - RJ, 2020
3. Pedro C. S. Lara, F. R. Henriques e Fábio Borges. «Converting Symmetric Cryptography to SAT Problems Using Model Checking Tools». Em: *XX Simpósio Brasileiro em Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (XX SBSEG 2020)*. Petrópolis - RJ, 2020
4. Elaine. Bernine, T. R. N. Ferreira, D. PEREIRA e Fábio Borges. «Cenário após a Vacinação da População Brasileira Contra a COVID-19 através da Modelagem Matemática». Em: *XXIII Encontro Nacional de Modelagem Computacional (XXIII ENMC)*. Palmas - TO, 2020
5. Thays R. N. Fereira, E. Bernine, D. Pereira e Fábio Borges. «Processo de Transmissão da COVID-19 na População Brasileira». Em: *Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional*. Campo Grande - MS, 2020

#### **4.4. Participação em Eventos Científicos**

Participação no XX Simpósio Brasileiro de Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (SBSeg 2020), participantes:

1. Aline de Lurdes Zuliani Lunkes
2. Fábio Borges de Oliveira
3. Paulo Ricardo Borré Reis
4. Thays Rocha Neri Ferreira
5. Yuri Gonçalves Miguel

#### **4.5. Palestras a Convite**

1. Seminário LNCC 40 anos - Fábio Borges (LNCC/MCTI)  
<https://www.youtube.com/watch?v=1xule2vticQ>
2. Fui convidado a escrever um texto de divulgação científica divulgado na web: Privacidade em Tempo de Pandemia - COVID-19. SBC Horizontes, 29 abr. 2020  
<http://horizontes.sbc.org.br/index.php/2020/04/privacidade-em-tempo-de-pandemia-covid-19/>

#### **4.6. Desenvolvimento de Programas e Produtos**

Incluimos novos algoritmos em uma biblioteca de criptografia com algoritmos simétricos e assimétricos para a Petrobras proteger dados de geo-mecânica processados com a linguagem Fortran.

O software e suas atualizações têm sido entregues a Petrobras. Estamos finalizando em 2021.

#### **4.7. Dissertações e Teses Defendidas**

Dissertação de mestrado 1. Diogo Pereira da Silva Santos. Identity-based Proxy Re-Encryption with Equality Test. 2020. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ. Orientador: Fábio Borges de Oliveira.

Outras em andamento.

### **5 Impactos da pesquisa na sociedade**

O TSE gastou R\$ 26,2 milhões para contar os votos em um supercomputador que fica na sala-cofre do tribunal. Além disso gastou R\$ 19.564.473,36 com a Oracle do Brasil em 2020. No DOU existem diversas publicações sobre contratação da Oracle com inexigibilidade de licitação. Os tribunais "utilizam o sistema de banco de dados Oracle há mais de uma década e os serviços da Oracle foram contratados em todas as eleições que utilizaram o sistema de votação eletrônica desde 1996". Toda essa contagem poderia ser feita de forma mais transparente no LNCC usando criptografia homomórfica e transmitindo muito mais confiança do que a Oracle do Brasil. Além

disso, tais pesquisas são importantes para manter a segurança e privacidade em prontuários médicos, processamento em nuvens, infraestrutura crítica, dispositivos pessoais (IoT), em geral em tecnologias da informação e comunicação.

## **6 Atividades Projetadas para 2021**

- Defesa da dissertação de mestrado do Elaine.
- Defesa da dissertação de mestrado do Paulo.
- Defesa da dissertação de mestrado do Thays.
- Defesa da dissertação de mestrado do Matheus Aranha.
- Publicações de artigos em periódicos.
- Finalização do projeto com a Petrobras.
- Ministrando disciplinas na pós-graduação

## **7 Outras Informações Relevantes**

Foi realizado o XX Simpósio Brasileiro de Segurança da Informação e de Sistemas Computacionais (SBSeg) que é um evento científico promovido anualmente pela Sociedade Brasileira de Computação (SBC). Ele representa o principal fórum do país para divulgação de resultados de pesquisas, debates, intercâmbio de ideias e atividades relevantes ligadas à segurança da informação e de sistemas computacionais, integrando a comunidade brasileira de pesquisadores e profissionais atuantes nessa área. A 20ª edição do simpósio foi realizada e está no processo de prestação de contas, pela primeira vez online em 20 anos.



# GCQC

COMPUTAÇÃO QUÂNTICA E CRIPTOGRAFIA



***Renato Portugal***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

A missão do grupo de computação quântica do LNCC é desenvolver pesquisa original nas áreas de computação quântica e informação quântica, supervisionar estudantes de mestrado e doutoramento, buscar colaborações nacionais e internacionais a fim de aumentar a qualidade da pesquisa desenvolvida pelo grupo, propor novas técnicas, seguir, e, se possível, participar do desenvolvimento do hardware quântico. Para alcançar esta missão, o grupo de computação quântica desenvolve e implementa algoritmos quânticos baseados em passeios quânticos nos computadores quânticos da IBM e desenvolve simulações computacionais de sistemas quânticos e computação quântica usando processamento de alto desempenho (PAD) empregando as seguintes linguagens: Python, C, OpenCL, Cuda, Neblina. O grupo também desenvolve simuladores para plataformas de PAD visando pesquisadores que trabalham tanto em computação quântica quanto em mecânica quântica. Os membros do grupo também usam linguagens de computação algébrica, com conhecimento avançado nas linguagens Matemática e Maple.

## **1 Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

Renato Portugal - Comac

Fabio Borges - Cotic (na parte de criptografia)

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

- Pos-Doutores: Jalil Kathibi Moqadam
- Doutorandos: Cauê Teixeira, Frank Acasiete, Frederico Cabral, Pedro Lugão
- Mestrandos: Gustavo Bezerra

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais: Celina Figueiredo (UFRJ), Daniel Posner (pós-doutorando UFRJ), Fernando Bandeira de Melo (CBPF), Franklin Marquezino (UFRJ), Gabriel Coutinho (DCC/UFMG), Marcos Cesar de Oliveira (Unicamp), Pedro Lara (CEFET), Tharso D. Fernandes (UFES).
- Internacionais: Raqueline A. M. Santos (University of Latvia), Raul Donangelo (Udelar), Alejandro Romanelli (Udelar), Andris Ambainis (University of Latvia), Etsuo Segawa (Tohoku University), Norio Konno (Yokohama National University), Pedro Costa (pós-doutorando Macquarie University), Stefan Boettcher (Emory University)

### **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

- Tema 1: Computação quântica
- Tema 2: Passeios quânticos
- Tema 3: Simulação de computação quântica usando HPC

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação: Computação Quântica I (GB 120), Computação Quântica II (GB 121), Tópicos Avançados de Computação Quântica (GB 500),
- Mini-cursos / Escolas / Congressos: Minicurso de Computação Quântica na escola de verão do LNCC, SBMAC, SBC, Spolm,

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Projeto 1

Cientista do Nosso Estado: Algoritmos Quânticos: Desenvolvimento, Análise e Implementação. 01/11/2018 a 31/10/2021.

Descrição: O projeto de pesquisa Algoritmos Quânticos: Desenvolvimento, Análise e Implementação se insere na área de Computação Quântica e visa ao desenvolvimento de novos algoritmos quânticos para o problema da distinção de elementos e para problemas de busca espacial em grafos. Além disso, visa também à análise de passeios quânticos em grafos, construção de um simulador usando computação de alto desempenho e implementação dos algoritmos em computadores quânticos de 5, 16 e 20 qubits disponibilizados pela IBM.

### 2.2. Projeto 2

Bolsa de Produtividade 1D: Algoritmos Quânticos baseados em Passeios Quânticos e Implementação em Computadores Quânticos. 01/03/2016 a 28/02/2020.

Descrição: O projeto de pesquisa *Algoritmos Quânticos baseados em Passeios Quânticos e Implementação em Computadores Quânticos* visa ao desenvolvimento de novo algoritmos quânticos. Usamos o passeio quântico escalonado porque este modelo é útil tanto nos problemas de busca quanto na implementação física em laboratórios. Este projeto tem um forte *caráter inovador* tanto na área específica de passeios quânticos e grafos (o passeio escalonado foi desenvolvido recentemente pelo autor deste projeto junto com colaboradores e sua definição se baseia no conceito de tessalabilidade de grafos), quanto na implementação em computadores quânticos disponibilizados recentemente para uso da comunidade científica (não há ainda implementação de algoritmos baseados em passeios quânticos em computadores quânticos).

## 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1. Passeios Quânticos Escalonados

Recentemente, o GCQC desenvolveu um novo modelo de passeios quânticos chamado passeio quântico escalonado (*staggered quantum walk*) [1], que teve vários desdobramentos [2, 3, 4, 5, 6]. Este novo passeio quântico é mais geral do que o modelo com moeda e inclui o modelo de Szegedy [7] como caso particular. A Ref. [1] é vencedora do prêmio *Howard E. Brandt Best Paper Award* de 2017 da revista *Quantum Information Processing*. A generalização do modelo usando Hamiltonianos foi desenvolvida em [8], e usando esta generalização, obtive junto com um aluno de doutoramento (Tharso Fernandes) um novo algoritmo quântico de busca na malha quadrada [9]. Este resultado positivo justifica o investimento em novos algoritmos de busca usando o modelo escalonado em outros grafos.

Para definir o operador de evolução de um passeio quântico escalonado em um grafo, é necessário obter uma cobertura do grafo através de um conjunto de tesselagens. Uma tesselação é uma partição do conjunto de vértices em cliques e uma cobertura é um conjunto de tesselagens que cobre as arestas do grafo. O grafo completo é 1-tesselável, isto é, pode ser coberto com uma única tesselação. No entanto, um grafo genérico é  $t$ -tesselável onde  $t$  é maior ou igual a 2. A determinação de uma

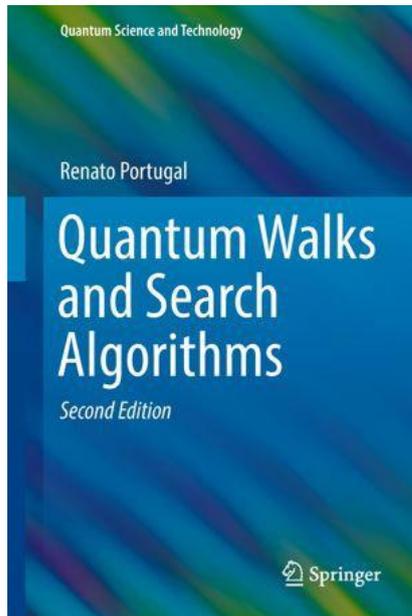
cobertura mínima é um problema não-trivial, o qual é importante de ser analisado para determinar o operador de evolução e para a elaboração de um simulador clássico de passeios escalonados. Recentemente, obtivemos os parâmetros ótimos do algoritmo proposto por Ambainis para o problema da distinção de elementos [10]. Note que Ambainis não teve sucesso em determinar os parâmetros ótimos porque o método usado por ele é por demais complexo. Na minha formulação, os passeios quânticos escalonados simplificaram a descrição. O algoritmo de Ambainis é ótimo apenas quando o  $k=2$  ( $k$  é o número de repetições). Uma das propostas de pesquisa deste projeto é obter o algoritmo ótimo para  $k$  maior do que 2.

O problema da distinção de elementos tem aplicações para diversos problemas computacionais, especialmente a versão com mais de dois elementos repetidos. Por exemplo, a moda estatística é definida como o elemento que tem o maior número de repetições em uma lista amostral e pode ser calculada usando o algoritmo de distinção de elementos, o que justifica a escolha deste tema em particular. Porém, uma segunda razão é que como desenvolvi um conhecimento detalhado do algoritmo para obter os parâmetros ótimos do algoritmo de Ambainis, minha proposta para o algoritmo ótimo quando  $k$  é maior do que 2 tem boas chances de ser bem sucedida.

## Referências

- [1] R. Portugal, R. A. M. Santos, T. D. Fernandes, and D. N. Gonçalves. The staggered quantum walk model. *Quantum Inf. Process.*, 15(1):85–101, 2016.
- [2] R. Portugal. Establishing the equivalence between Szegedy’s and coined quantum walks using the staggered model. *Quantum Inf. Process.*, 15(4):1387–1409, 2016.
- [3] R. Portugal. Staggered quantum walks on graphs. *Phys. Rev. A*, 93:062335, 2016.
- [4] J. Khatibi Moqadam, M. C. de Oliveira, and R. Portugal. Staggered quantum walks with superconducting microwave resonators. *Phys. Rev. B*, 95:144506, 2017.
- [5] R. Portugal and E. Segawa. Connecting coined quantum walks with Szegedy’s model. *Interdisciplinary Information Sciences*, 23(1):119–125, 2017.
- [6] G. Coutinho and R. Portugal. Discretization of continuous-time quantum walks via the staggered model with Hamiltonians. *Nat. Comput.*, arxiv:1701.03423, 2018.
- [7] M. Szegedy. Quantum speed-up of Markov chain based algorithms. In *Proc. 45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, FOCS ’04*, pages 32–41, Washington, 2004.
- [8] R. Portugal, M. C. de Oliveira, and J. K. Moqadam. Staggered quantum walks with Hamiltonians. *Phys. Rev. A*, 95:012328, 2017.
- [9] R. Portugal and T. D. Fernandes. Quantum search on the two-dimensional lattice using the staggered model with Hamiltonians. *Phys. Rev. A*, 95:042341, 2017.
- [10] R. Portugal. Element distinctness revisited. *Quantum Inf. Process.*, 17(7):163, 2018.

**3.2. Livro: Quantum Walks and Search Algorithms, Springer, 2nd edition, 2018**



**4 Resultados Científicos e Tecnológicos**

**4.1. Artigos Científicos em Periódicos**

1. CHAGAS, BRUNO; Portugal, Renato Discrete-Time Quantum Walks on Oriented Graphs. ELECTRONIC PROCEEDINGS IN THEORETICAL COMPUTER SCIENCE. , v.315, p.26 - 37, 2020.
2. ACASIETE, F.; AGOSTINI, F. P.; MOQADAM, J. KHATIBI; Portugal, R. Implementation of quantum walks on IBM quantum computers. Quantum Information Processing. , v.19, p.1 - 20, 2020.
3. Abreu, A.; Cunha, L.; DE FIGUEIREDO, C.; Kowada, L.; MARQUEZINO, F.; Posner, D.; Portugal, R. The graph tessellation cover number: Chromatic bounds, efficient algorithms and hardness. THEORETICAL COMPUTER SCIENCE. , v.801, p.175 - 191, 2020.
4. VALLEJO, ANDRÉS ; ROMANELLI, ALEJANDRO; DONANGELO, RAÚL ; Portugal, Renato . Entropy production in the quantum walk. PHYSICAL REVIEW A, v. 99, p. 032319, 2019.
5. COUTINHO, GABRIEL ; Portugal, Renato . Discretization of continuous- time quantum walks via the staggered model with Hamiltonians. Natural Computing, v. 18, p. 403-409, 2019.
6. HIGUCHI, YUSUKE ; Portugal, Renato ; SATO, IWAO ; SEGAWA, ETSUO. Eigenbasis of the evolution operator of 2-tessellable quantum walks. LINEAR ALGEBRA AND ITS APPLICATIONS, v. 583, p. 257-281, 2019.
7. COSTA, PEDRO C. S. ; DE MELO, FERNANDO ; Portugal, Renato . Multiparticle quantum walk with a gaslike interaction. PHYSICAL REVIEW A, v. 100, p. 042320, 2019.

## **4.2. Dissertações e Teses Defendidas**

1. Juan del Carmen Grados Vásquez. Post-Quantum Cryptography: An Efficient Differential Fault Analysis Attack and a New One-Time Signature Scheme. 2018. Doutorado em Modelagem Computacional, LNCC.
2. Bruno Chagas. Caminhada Quântica Escalonada em Grade Hexagonal. 2018. Doutorado em Modelagem Computacional, LNCC.



# COMOHR

COMPUTATIONAL MODELING OF HYDROCARBON RESERVOIRS



**Marcio Arab Murad**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

A missão do grupo COMOHR é o desenvolvimento e implementação de novos modelos computacionais multiescala para descrever o acoplamento hidromecânico em meios porosos. Em particular, temos como foco processos relacionados à prospecção de hidrocarbonetos em reservatórios de petróleo, bem como a construção de ferramentas computacionais para integrar informações de escala fina em simuladores comerciais usados pela indústria.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

##### **Membros:**

- Márcio Arab Murad - COMOD (Coordenador)
- Eduardo Lucio Mendes Garcia – COMOD

##### **Colaboradores:**

- Marcio Rentes Borges - COMOD
- Fábio Lima Custódi - COMOD
- Gilson Antônio Giraldi - COMAC
- João Guerreiro Nisan – COMOD

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

- Pós-Doutores:
  - Josué dos Santos Barroso - LNCC/Brasil
  - Patrícia de Araújo Pereira - LNCC/Brasil
  - Tuane Vanessa Lopes - LNCC/Brasil
- Doutorandos:
  - Eduardo da Silva Castro - LNCC/Brasil
  - Eliaquim Monteiro Ramos - LNCC/Brasil
  - Natanael Junior Soares Bento - LNCC/Brasil
- Mestrandos:
  - Iury Coimbra - LNCC/Brasil
  - Sandro Carvalho Valente - LNCC/Brasil

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:
  - Sidarta Lima - UFRN (membro do grupo)
  - Eduardo Abreu - UNICAMP
  - Francisco Hilário Bezerra - UFRN
  - Francisco Pinheiro - UFRN

- Igor Mozolevsky - UFSC
  - Maicon Correa - UNICAMP
  - Rafael Silva - Cenpes/Petrobras
  - Flavia Falcão - Cenpes/Petrobras
  - Marcos Vitor Barbosa Machado - Cenpes/Petrobras
- Internacionais:
    - Christian Moyne (LEMTA/França)
    - Tien Dung Le (LEMTA/França)

## 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- **Título:** Modelos Computacionais Multiescala para Escoamento em Reservatórios com Complexidade Geológica.  
**Descrição:** Desenvolvimento de modelos para descrever a hidrogeo- mecânica em reservatórios fraturados, carstificados e com falhas geoló- gicas.
- **Título:** Plugins para incorporação de complexidades geológicas em si- muladores comerciais  
**Descrição:** Elaboração de plugins que estendam as funcionalidades dos simuladores comerciais a fim de incorporar complexidades geológicas através de propriedades macroscópicas equivalentes.
- **Título:** Geração de afloramentos sintéticos  
**Descrição:** Desenvolvimento e aplicação de técnicas de aprendizado de máquina que visam a geração de afloramentos sintéticos análogos a reservatórios a partir de afloramentos naturais.
- **Título:** Interpolação e filtragem de dados geológicos  
**Descrição:** Desenvolvimento de metodologias para o preenchimento de propriedades e estruturas geológicas em regiões não amostradas, a partir da utilização de técnicas de aprendizado de máquina alimentadas com dados obtidos nas adjacências.
- **Título:** Desenvolvimento de modelos hidromecânicos para escoamento trifásico com efeitos de histerese nas propriedades elasto-plásticas.  
**Descrição:** Desenvolvimento de algoritmos robustos para acoplamento entre escoamento, geomecânica e transporte considerando dependência propriedades petrofísicas e de resistência mecânica com memória da deformação.
- **Título:** Métodos de Galerkin Descontínuo para Escoamento em Meios Porosos Fraturados  
**Descrição:** Desenvolvimento de formulações de GD baseadas em pe- nalidade e simetria da hidrodinâmica em modelos de fraturas dis- cretas (Discrete Fracture Modeling)

### 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - GA-017 – Introdução a Programação de Computadores – Prof. Eduardo Garcia
  - GA-018 – Métodos Numéricos – Prof. Pablo Blanco, Prof. Marcio Murad e Prof. Marcio Borges
  - GB-163 Escoamento em Meios Porosos - Prof. Marcio Murad
- Mini-cursos / Escolas / Congressos

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Novos Modelos Computacionais Multiescala de Acoplamento Hidro-Mecânico em Meios Porosos Fraturados e Carstificados

**Descrição:** O objetivo deste projeto de pesquisa é a construção de um modelo computacional multiescala inovador para descrever o acoplamento hidromecânico e químico em reservatórios fraturados e carstificados.

**Vigência:** 01 de janeiro de 2018 a 31 de dezembro de 2020.

**Instituição de Fomento:** FAPERJ - Programa Cientistas do Nosso Estado

### 2.2. VISCARB - Atlas digital Interativo com Visualização 3D de Análogos em várias escalas e Modelagem Multiescalar

**Descrição:** Esse projeto visa desenvolver, em conjunto com a universidade Unisinos, um Atlas Digital Interativo com visualização 3D de análogos em várias escalas com ferramenta de apoio a interpretação e modelagem multiescalar. O Atlas compõe um conjunto de soluções integradas capaz de gerenciar, processar, compartilhar, visualizar, interpretar e modelar de forma integrada modelos digitais de análogos 3D obtidos por diversas técnicas e em várias escalas.

**Vigência:** 28 de fevereiro de 2018 a 20 de dezembro de 2020.

**Instituição de Fomento:** Petrobras

### 2.3. GEOMEC - Modelagem Computacional Multiescala Hidro-Geomecânica de Carbonatos Fraturados Carstificados

**Descrição:** Desenvolvimento de uma metodologia para o cômputo de propriedades equivalentes dependentes do estado de tensão capazes de incorporar a presença de estruturas geológicas complexas nas escalas mais finas tais como carste, fraturas e falhas.

**Vigência:** 26 de agosto de 2018 a 24 de agosto de 2022.

**Instituição de Fomento:** Petrobras

## **2.4. Novos Modelos Hidro-Mecânicos Multiescala de Meios Porosos com Complexidade Geológica**

**Descrição:** Desenvolvimento de uma nova metodologia para descrever o acoplamento hidro-mecânico em meios porosos caracterizados pela presença de estruturas geológicas de extrema complexidade. Neste cenário daremos ênfase aos meios fraturados e carstificados, comumente encontrados nas rochas carbonáticas que compõem o pré-sal brasileiro.

**Vigência:** 19 de julho de 2019 a julho de 2024.

**Instituição de Fomento:** CNPq

## **3. Destaques Científicos e Tecnológicos**

Descrever os resultados destacados do GP. Sugere-se utilizar entre meia e uma página por cada destaque. Estima-se o uso de uma figura por destaque para ilustrar o resultado destacado, caso haja alguma ilustração pertinente.

### **3.1. Modelagem Multiescala do Acoplamento Hidrodinâmico entre Condutos Cársticos e Rochas Adjacentes**

Ao longo do presente ano, o grupo consolidou metodologias de incorporação de propriedades equivalentes culminando na elaboração de uma formulação altamente inovadora para descrever troca de massa entre condutos carstificados e rocha intacta, visando aplicação em reservatórios do Pré-Sal brasileiro.

### **3.2. Construção de um Plug-In para Incorporar Efeitos Geomecânicos em Simuladores de Reservatório**

O grupo CoMoHR liderou um *benchmark* de simulação hidromecânica de rochas fraturadas, o qual teve participação de diversos grupos acadêmicos vinculados ao CENPES/Petrobras. A elaboração desses testes, bem como a interação entre equipes de pesquisa, resultaram em diversos conhecimentos que poderiam ser aplicados no dia a dia do engenheiro de reservatórios. Com esse objetivo, damos continuidade ao desenvolvimento de um plug-in que realiza o cômputo de tabelas de pseudoacoplamento para células de simulação, concretizando os conhecimentos adquiridos. Tais tabelas tem como função viabilizar computacionalmente a incorporação dos efeitos geomecânicos, bem como da influência da rede de fraturas, em simulações hidrodinâmicas de reservatórios.

### **3.3. Modelagem de Histerese em Geomecânica Baseada em Dados**

O grupo COMOHR vem desenvolvendo uma metodologia inovadora baseada em dados para descrever fenômenos observados experimentalmente pelo grupo do Cenpes de Ensaio de Rochas referente a construção de propriedades Petrofísicas dependentes do caminho de deformação.

### **3.4. Novas Condições de Transmissão entre Objetos Geológicos e Rochas Carbonáticas**

Explorando técnicas multiescala aliadas a redução de dimensão (Modle Reduction) a equipe construiu novas condições de transmissão nas extremidades de diversas estruturas geológicas tais como Fraturas e Carste

## 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- Murad, Marcio A.; Lopes, Tuane V.; Pereira, Patricia A.; Bezerra, Francisco H.R.; Rocha, Aline C.. *A three-scale index for fl in karst conduits in carbonate rocks*. ADVANCES IN WATER RESOURCES, v. 141, p. 103613, 2020.
- Lima, Sidarta A.; Murad, Marcio A.; Puime, Adolfo. *A New Multiscale Computational Model for Low Salinity Waterflowing in Clay Bearing Sandstones*. TRANSPORT IN POROUS MEDIA, v. 1, p. 1-1, 2020.
- Barroso, Josue; Murad, Marcio A.; Pereira, Patricia. *A new two-scale computational model for hydromechanical coupling in jointed rocks*. COMPUTERS & MATHEMATICS WITH APPLICATIONS, 2020.
- Borges, M. R.; PEREIRA, F. . *A novel approach for subsurface characterization of coupled flow and geomechanical deformation: the case of slightly compressible flow*. COMPUTATIONAL GEOSCIENCES, v. 24, p. 1693-1706, 2020.
- Murad, Marcio A.; Correa, Maicon R.; Borges, Marcio R.; Obregón, Jesus L. O.; Lopes, Tuane V.. *A Fixed-Stress Split Strategy for Two-Phase Flow in Heterogeneous Poroelastic Media Overlain by Viscoelastic Rock Salt Layers*. COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING (to be accepted)

### 4.2. Palestras à Convite

- Marcio Arab Murad. *Multiscale Modeling for Flow and Deformation In PaleoKarst Reservoirs*. SIAM Conference on Mathematical Computational Issues in the Geosciences, 2021
- Marcio Arab Murad, *Multiscale Models for Flow in PaleoKarst Reservoirs X WORKSHOP ON POROUS MEDIA – FLOW IN POROUS MEDIA AND FRACTURES*, on July 17th, 2020 (online).
- Marcio Arab Murad, *A Modelagem Computacional Multi-escala de Meios Porosos Heterogêneos e os Novos Desafios do Pré-Sal*, Seminários LNCC 40 anos, 22 de junho de 2020.
- Marcio Arab Murad. *A sequential formulation for coupling flow and geomechanics incorporating stress-dependent permeability hysteresis*. I WEBINAR dos Termos de Cooperação da Gerência de Geologia e Geomecânica de Reservatórios (CENPES/Petrobras), 5 de agosto de 2020.
- Tuane Lopes e Josue Barroso. *Plugin de Propriedades Equivalentes*. I WEBINAR dos Termos de Cooperação da Gerência de Geologia e Geomecânica de Reservatórios (CENPES/Petrobras), 5 de agosto de 2020.
- Patrícia de Araújo Pereira. *Incorporação de Conduitos Cársticos em Simuladores Comerciais via Fatores de Skin Geométrico e de Dano Associado à Seções Não-circulares e Presença de Brechas de Colapso*. I WEBINAR dos Termos de Cooperação da Gerência de Geologia e Geomecânica de Reservatórios (CENPES/Petrobras), 23 de setembro de 2020.

### 4.3. Desenvolvimento de Programas e Produtos

- Desenvolvimento de plug-in para o software Gocad utilizado pela Petrobras. O objetivo do plug-in é o cômputo de permeabilidades equivalentes em escalas grosseiras em reservatórios fraturados com magnitude dependente do estado de tensão (tabela de pseudoacoplamento).

### 4.4. Dissertações e Teses Defendidas

- Sandro Carvalho Valente. *Uma Nova Classe de Modelos Perturbativos para Descrição da Troca de Massa entre Redes de Condutos Carstificados e Matriz em Rochas Carbonáticas* (2020), Dissertação de Mestrado em Modelagem Computacional - Laboratório Nacional de Computação Científica. Orientador: Marcio Arab Murad, Co-orientador: Patrícia de Araújo Pereira.

## 5. Atividades Projetadas para 2021

- Intensificar as parcerias existentes, sobretudo com os geólogos visando simulações mais realistas.
- Aumentar funcionalidades do plugin de propriedades equivalentes através da interação entre os futuros usuários da Petrobras.
- Desenvolver o treinamento de Metamodelos baseados em Redes Neurais para reproduzir os modelos de alta fidelidade

## 6. Outras Informações Relevantes

- Após ter sido selecionado dentre vários candidatos, o pesquisador do LNCC Marcio Murad foi convidado como Professor Visitante da *Université de Lorraine* período 1 mes (2021).
- O comitê brasileiro da Interpore, onde membros do grupo fazem parte da vice-presidência e conselho, caracterizado por uma organização científica internacional que congrega pesquisadores e representantes da indústria, área de meios porosos, ganhou o InterPore National Chapter Award. O prêmio foi concedido ao país pelas atividades científicas da área desenvolvidas no Brasil nos últimos anos.
- A equipe foi nomeada pelos fundadores da Interpore para o prêmio máximo oferecido por esta organização relacionado ao Lifetime Achievement.
- A equipe foi convidado para ministrar uma plenária no maior evento de geociências computacional organizado pelo SIAM, Conference on Mathematical & Computational Issues in the Geosciences em 2021.



# ASTOP

ANÁLISE DE SENSIBILIDADE TOPOLÓGICA



**André Novotny**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O Grupo de Pesquisa ASTOP tem como objetivo principal dar continuidade ao desenvolvimento teórico e aplicações da Análise de Sensibilidade Topológica em otimização topológica, problemas inversos, processamento de imagens, síntese e/ou projeto ótimo de microestruturas e modelagem de fenômenos dissipativos, incluindo mecânica da fratura e do dano. Em particular, objetiva-se utilizar a derivada topológica de primeira ordem na modelagem do fraturamento hidráulico e o conceito de derivada topológica de ordem superior na resolução de certas classes de problemas inversos de reconstrução.

## 1. Grupo de Pesquisa

### 1.1. Equipe

#### 1.1.1. Pesquisadores

- Membros da COMAC: André Novotny, Frédéric Valentin, Gustavo Perla e Jaime Rivera
- Membros da COMOD: Abimael Fernando Dourado Loula e Márcio Arab Murad

#### 1.1.2. Alunos e pós-Doutores

- Pós-Doutores: Lucas dos Santos Fernandez
- Doutorandos: Raquel Mattoso (LNCC), Jorge Luz (LNCC), Andressa da Silva (LNCC), Dirlei Ruscheinsky (UnB), Fernando Carvalho (UnB), Valentin Calisti (IECN, França) e Akshay Desai (IISc, Índia)

#### 1.1.3. Pesquisadores Colaboradores

- Nacionais: Marcel Xavier (UFF), Lucas Heitzmann (UNICAMP), Carla Anflor (UnB), Antoine Laurain (USP), Emílio Silva (USP), Antonio Leitão (UFSC) e Eduardo Fancello (UFSC).
- Internacionais: Jan Sokolowski (IECN, França), Samuel Amstutz (Université d'Avignon, França), Nicolas Van Goethem (Universidade de Lisboa, Portugal), Sebastián Giusti (UTN, Argentina), Eduardo Alberto de Souza Neto (University of Wales, Reino Unido), Ravi Prakash (Universidad de Concepción, Chile), Bojan Guzina (University of Minnesota, EUA), Julián Norato (University of Connecticut, EUA), Alan Amad (Zienkiewicz Centre for Computational Engineering, UK) e Gondi Kondaiiah Ananthasuresh (Indian Institute of Science)

### 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- Tema 1: *Reconstrução de Fontes Poluidoras*, que consiste em determinar o número, localização e intensidade de um conjunto de fontes poluidoras pontuais imerso em um domínio geométrico a partir de medidas da concentração de poluente tomadas em parte da fronteira do referido domínio.
- Tema 2: *Reconstrução de Anomalias Utilizando Ondas Sísmicas*, que consiste em determinar o número, tamanho, forma e localização de um conjunto de anomalias imerso em um domínio geométrico a partir de medidas de ondas sísmicas tomadas em parte da fronteira do referido domínio.
- Tema 3: *Projeto de Antena em Hipertermia*, que consiste em determinar o número, localização e intensidade de um conjunto de eletrodos eletromagnéticos concentrados a fim de aquecer seletivamente células cancerosas provocando apoptose.
- Tema 4: *Modelagem do Fraturamento Hidromecânico*, que consiste em simular o processo de fraturamento hidráulico em rochas poroelásticas, desde a nucleação até a propagação final de redes de fraturas, incluindo características importantes tais como desvios e bifurcações.

### 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação: Análise de Sensibilidade.

## 2. Projetos de Pesquisa

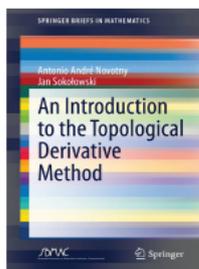
- Bolsa Produtividade em Pesquisa MCT/CNPq, Nível PQ-1B. Processo 310512/2017-4: Desenvolvimento de Novos Métodos de Resolução de Problemas Inversos Utilizando o Conceito de Derivada Topológica. Co-ordenador: André Novotny. Vigência: 48 meses.
- Bolsa de bancada Cientista do Nosso Estado, FAPERJ. Processo E-26/203.041/2017: Desenvolvimento de Novos Métodos de Resolução de Problemas Inversos Utilizando o Conceito de Derivada Topológica. Coordenador: André Novotny. Vigência: 36 meses.
- Edital Universal MCTIC/CNPq 28/2018. Processo 408274/2018-2: Desenvolvimento de Novos Métodos de Resolução de Problemas Inversos Utilizando o Conceito de Derivada Topológica. Coordenador: André Novotny. Vigência: 36 meses.
- ArchiMathOS Project: Matériaux architecturés conçus par homogénéisation d'ordre supérieur. Agence Nationale de la Recherche, France. Coordenador: Arthur Lebé, Chercheur au Laboratoire Navier, Paris, France. Vigência: 48 meses.

## 3. Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1. Publicação de Livro



springer.com



1st ed. 2020. X, 114 p. 24 illus., 6 illus. in color.

#### Printed book

Softcover  
49,99 € | £44,99 | \$59,99  
¥53,49 € (D) | 54,99 € (A) | CHF  
59,00

#### eBook

42,79 € | \$35,99 | \$44,99  
¥42,79 € (D) | 42,79 € (A) | CHF  
47,00

Available from your library or  
springer.com/shop

#### MyCopy<sup>1)</sup>

Printed eBook for just  
€ | \$ 24,99  
springer.com/mycopy

Antonio André Novotny, Jan Sokolowski

## An Introduction to the Topological Derivative Method

Series: SpringerBriefs in Mathematics

- Introduces the concept of topological derivative in a simple and pedagogical manner using a direct approach based on calculus of variations combined with compound asymptotic analysis
- Offers numerical methods in shape optimization, including algorithms and applications in the context of compliance structural topology optimization and topology design of compliant mechanisms
- Explores the mathematical aspects of topological asymptotic analysis as well as on applications of the topological derivative in computational mechanics, including shape and topology optimization

This book presents the topological derivative method through selected examples, using a direct approach based on calculus of variations combined with compound asymptotic analysis. This new concept in shape optimization has applications in many different fields such as topology optimization, inverse problems, imaging processing, multi-scale material design and mechanical modeling including damage and fracture evolution phenomena. In particular, the topological derivative is used here in numerical methods of shape optimization, with applications in the context of compliance structural topology optimization and topology design of compliant mechanisms. Some exercises are offered at the end of each chapter, helping the reader to better understand the involved concepts.

Order online at [springer.com/](http://springer.com/) or for the Americas call (toll free) 1-800-SPRINGER / or email us at: [customerservice@springernature.com](mailto:customerservice@springernature.com). For outside the Americas call +49 (0) 6221-345-4301 / or email us at: [customerservice@springernature.com](mailto:customerservice@springernature.com).

The first € price and the £ and \$ price are net prices, subject to local VAT. Prices indicated with [1] include VAT for books; the €(D) includes 7% for Germany, the €(A) includes 10% for Austria. Prices indicated with [2] include VAT for electronic products; 10% for Germany, 20% for Austria. All prices exclusive of carriage charges. Prices and other details are subject to change without notice. All errors and omissions excepted. [1] No discount for MyCopy.



Part of **SPRINGER NATURE**

### 3.2. Otimização topológica de estrutural

A.A. Novotny, C.G. Lopes and R.B. Santos. Topological Derivative-Based Topology Optimization of Structures Subject to Self-Weight Loading, Structural and Multidisciplinary Optimization, 2020.

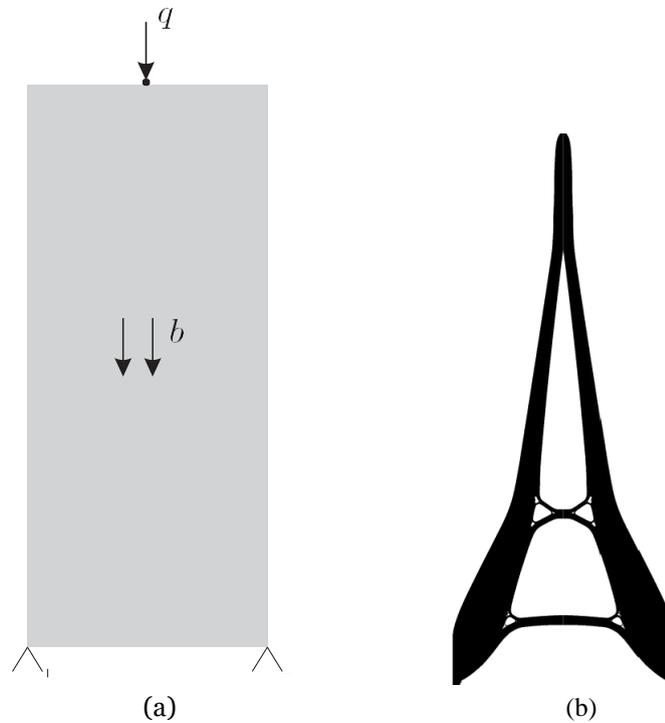


Figura 1: Otimização topológica de uma torre submetida a peso próprio: domínio inicial (a) e resultado obtido (b).

### 3.3. Projeto de Antena no Tratamento de Câncer por Hipertermia

R. Mattoso & A.A. Novotny, Pointwise Antennas Design in Hyperthermia Therapy, Applied Mathematical Modelling, 89:89-104, 2021.

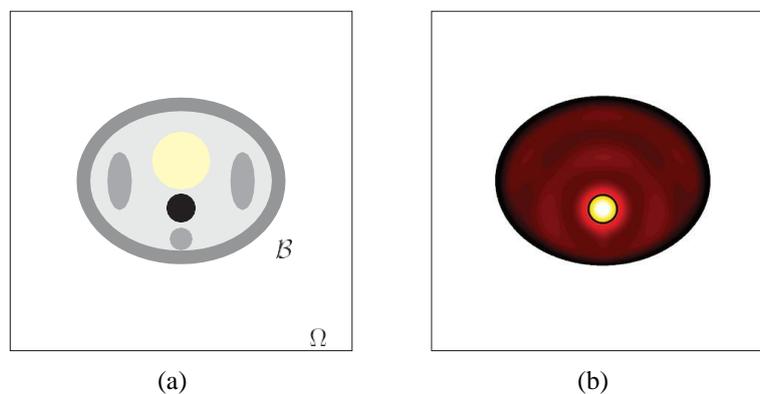


Figura 2: Tratamento de câncer de próstata por hipertermia: corte transversal do *phantom* da pelve masculina mostrando os diferentes tecidos (a) e distribuição de temperatura obtida (b), sendo preto/marrom mais frio e amarelo/branco mais quente.

## **4. Resultados Científicos e Tecnológicos**

### **4.1. Artigos Científicos em Periódicos**

A.A. Novotny, C.G. Lopes and R.B. Santos. Topological Derivative-Based Topology Optimization of Structures Subject to Self-Weight Loading, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020.

D. Ruscheinsky, F. Carvalho, C. Anflor, S.M. Giusti & A.A. Novotny. Topological Derivative-Based Topology Optimization of Plate Structures under Bending Effects. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 2020.

P. Menoret, M. Hrizi & A.A. Novotny. On the Kohn-Vogelius Formulation for Solving an Inverse Source Problem. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 2020.

D. Ruscheinsky, F. Carvalho, C. Anflor & A.A. Novotny. Topological asymptotic analysis of a diffusive-convective-reactive problem. *Engineering Computations*, 2020.

L. Fernandez, A.A. Novotny, R. Prakash & J. Sokolowski. Pollution sources reconstruction based on the topological derivative method. *Applied Mathematics & Optimization*, 2020.

R. Mattoso & A.A. Novotny, Pointwise Antennas Design in Hyperthermia Therapy, *Applied Mathematical Modelling*, 89:89-104, 2021.

A.A.S. Amad, A.A. Novotny & B.B. Guzina. On the full-waveform inversion of seismic moment tensors, *International Journal of Solids and Structures*, 202(1):717-728, 2020.

M. Xavier, A. A. Novotny & J. Sokolowski. Growth control of cracks under contact conditions based on the topological derivative of the Rice's integral. *Control and Cybernetics*, 48(2):307-323, 2020.

M. Xavier, N. Van Goethem & A.A. Novotny. Hydro-mechanical fracture modelling governed by topological derivatives. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 365:112974, 2020.

### **4.2. Livros e Capítulos de Livros**

A.A. Novotny & J. Sokolowski. *An Introduction to the Topological Derivative Method*. Springer Briefs in Mathematics. Springer Nature, Switzerland, 2020.

### **4.3. Palestras à Convite**

Colóquio de Matemática da UFSC, Florianópolis.  
Seminários LNCC 40 anos, Petrópolis.

### **4.4. Dissertações e Teses Defendidas**

Jorge Morvan Marotte Luz Filho. *Análise de Sensibilidade Topológica no Fraturamento Hidráulico*. LNCC/MCT, Petrópolis 2020. Orientadores: A.A. Novotny, M.A. Murad e M. Xavier.

#### **4.5. Participação como Membro em Comissões Nacionais/Internacionais ou Corpo Editorial**

Membro do corpo editorial do Latin American Journal of Solids and Structures e do Control and Cybernetics da Academia Polonesa de Ciências.

#### **5. Atividades Projetadas para 2021**

Realizar visita técnica à University of Minnesota, ao Indian Institute of Science e à Universidad de Concepción.

Receber no LNCC o Professor Ravi Prakash da Universidad de Concepción, Chile, por duas semanas em 2020.

Concluir a redação dos seguintes artigos científicos:

M. Hrizi, A.A. Novotny & M. Hassine. Imaging of mass distributions from partial domain measurement.

V. Calisti, A. Lebé, A.A. Novotny & J. Sokolowski. Sensitivity of the second order homogenized elasticity tensor to topological microstructural changes.

L. Fernandez, A.A. Novotny & R. Prakash. Imaging of small penetrable obstacles based on the topological derivative method.

A.J. Torii & A.A. Novotny. A priori error estimates for probability of failure sensitivity analysis with Monte Carlo Simulation.

#### **6. Outras Informações Relevantes**

Revisão de 21 artigos para periódicos científicos em 2020. Atuação como consultor *ad hoc* para CNPq e CAPES.



# NUMA

ANÁLISE NUMÉRICA E APLICAÇÕES



*Frédéric Valentin*

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O Grupo de Pesquisa NUMA objetiva desenvolver modernas técnicas e estratégias matemáticas visando a análise numérica de novos métodos e algoritmos numéricos, com aplicação na simulação computacional de modelos baseados em EDPs - Equações Diferenciais Parciais.

## **1 GrupodePesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Pablo Blanco - COMAC
- José Karam Filho - COMOD
- Abimael Loula - COMOD
- Alexandre Madureira - COMAC
- Sandra Malta - COMAC
- André Novotny - COMAC
- Frédéric Valentin - COMAC

#### **1.1.2. Alunos e Pós-Doutores**

- Pós-Doutores: Lucas Fernandez (LNCC), Jemy Mandujano Valle (LNCC), Luis Alonso Mansilla Alvarez (LNCC), Bernardo Martins Rocha (UFJF)
- Doutorandos: Larissa Martins (LNCC), Raquel Mattoso (LNCC), Jorge Luz (LNCC), Diego Volpato (LNCC), Ismael Iledoino (LNCC), Leonardo Mello (LNCC), Juliano Deividy Santos (LNCC), Denis Ordonio Hoyos (LNCC), Natanael Júnior Soares Bento (LNCC)
- Mestrandos: Franklin Da Conceição De Barros (LNCC), Laura C. P. Miranda (LNCC), Daiana Soares Barreiro (LNCC), José Damião Melo (DMMDC/UFBA-LNCC)
- Iniciação Científica: Perla Rocha (FGV)

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais: Henrique Versieux (UFMG), Sonia Gomes e Philippe Devloo (UNICAMP), Honório Fernando (UFF), Antoine Laurain (USP), Cristiane O. Faria (UERJ), Isaac Santos (UFES), Lucia Catabriga (UFES), Andrea Valli (UFES), Regina Leal Toledo (UFF), Rubens Cysne (FGV), Eduardo Campos (ENCE/IBGE, FGV), Rodrigo Weber dos Santos (UFJF), Marcio Bortoloti (UESB), Iury Igreja (UFJF), Claudia Mazza (UFRRJ), Gustavo Libotte (PCI/LNCC)
- Internacionais: Rodolfo Araya, Diego Paredes e Ravi Prakash (UDEC, Chile), Stephane Lanteri, Claire Scheid e Théophile Chaumont, Simon Lemaire (Inria, França), Alexandre Ern (CEMARCS, França), Gabriel Barrenechea (University of Strathclyde, UK), Christopher Harder (Ms-Denver, EUA), Jan Sokolowski (IECN, França), Marcus Sarkis (WPI, EUA), Alessandro Veneziani (Emory University, USA)

## 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- Tema 1: Análise Numérica de Métodos Numéricos Multi-Escalas
- Tema 2: Desenvolvimento de Novos Métodos de Resolução de Problemas Inversos
- Tema 3: Epidemiologia e modelagem sócio-econômica
- Tema 4: Métodos Numéricos para a Simulação do Escoamento Sanguíneo
- Tema 5: Métodos Numéricos Estabilizados e Análise Numérica em Problemas de Fenômenos de Transporte
- Tema 6: Modelagem Computacional em Sistemas Sócio-educacionais- Difusão do Conhecimento

## 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - Análise Numérica de Elementos Finitos (PG-LNCC)
  - Análise de Sensibilidade (PG-LNCC)
  - Análise na Reta (PG-LNCC)
  - Cálculo Variacional (PG-LNCC)
  - Métodos Numéricos - Módulo 1 (PG-LNCC)
  - Métodos de Elementos Finitos Híbridos de Alta Ordem: Análise Numérica e Implementação Computacional (PG-LNCC)
  - Fundamentos de Modelagem (PG-LNCC)
- Mini-cursos / Escolas / Congressos
  - Mini-curso sobre o método MHM no LNCC, março de 2020 no Programa de Verão 2020 do LNCC.

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Desenvolvimento e análise de métodos de elementos finitos híbridos de alto desempenho

- Vigência: 01/01/2019 - 01/02/2022
- Financiamento: Produtividade em Pesquisa - CNPQ. No. 307392/2018-  
Coordenador: Alexandre Madureira.
- Resumo: O interesse é desenvolver métodos aproximem soluções de EDPs exigindo regularidade mínima na presença de alto contraste. A primeira classe de método baseia-se em decomposições espectrais localizadas. A segunda classe envolve o desenvolvimento e análise de novos métodos de elementos finitos multiescalas “duplamente híbridos”.

## **2.2. Desenvolvimento e análise de métodos de elementos finitos híbridos de alto desempenho**

- Vigência: 01/01/2020 - 31/12/2021
- Financiamento: FAPERJ, Edital Apoio a Pesquisa 2019 E-26/010.001941/2019. Coordenador: Alexandre Madureira.
- Resumo: O objetivo é desenvolver e analisar métodos de elementos finitos do tipo híbrido para aproximar soluções de certas Equações Diferenciais Parciais (EDPs) elípticas. As EDPs a serem investigadas apresentam características que dificultam ou mesmo impossibilitam boas aproximações via métodos clássicos. Os métodos a serem investigados são adequados a computação de alto desempenho.

## **2.3. Métodos Multi-Escalas: Uma Abordagem Precisa e Realista para a Simulação de Escoamentos Complexos**

- Vigência: 01/02/2013 - 01/02/2021
- Financiamento: Produtividade em Pesquisa - CNPQ. No. 301576/2013-
- Coordenador: Frederic Valentin
- Resumo: Este projeto pretende desenvolver e analisar matematicamente novos métodos de elementos finitos multiescalas e estimadores de erro a posteriori para problemas com coeficientes altamente heterogêneos e/ou singularmente perturbados.

## **2.4. Métodos de Elementos Finitos Mistos e Híbridos em Mecânica do Contínuo**

- Vigência: 26/05/2017 - 26/04/2022
- Financiamento: Produtividade em Pesquisa - CNPQ. No. 312388/2016-
- Coordenador: Abimael Loula.
- Resumo: Formulação, análise e implementação computacional de métodos de elementos finitos mistos e híbridos para solução de problemas acoplados em elasticidade, poroelasticidade, meios porosos e ondas harmônicas no tempo.

## **2.5. Modelagem computacional do sistema cardiovascular humano orientada a pacientes específicos**

- Vigência: 01/01/2020 - 31/12/2022
- Financiamento: Produtividade em Pesquisa - CNPQ. No. 304309/2019-
- Coordenador: Pablo Blanco.

- **Resumo:** Ao longo dos últimos anos, a interação cada vez mais frequente entre pesquisadores da área de modelagem computacional e profissionais da área médica tem resultado no desenvolvimento e aplicação de ferramentas baseadas em modelos matemático-computacionais dentro de diferentes áreas da prática médica, demonstrando o grande potencial desta ferramenta para utilização na prática clínica. Estes esforços, somados ao aumento do poder de cálculo dos computadores e à evolução da qualidade e quantidade de informações fornecidas pelas máquinas da aquisição de imagens médicas, tem dado lugar ao surgimento de novos paradigmas na medicina: a medicina individualizada a populações e pacientes específicos, e a medicina assistida por modelagem computacional e simulação numérica. Visando solidificar esta linha de pesquisa altamente interdisciplinar e inovadora, e objetivando propor novas soluções a diversos problemas encontrados na área da saúde, a missão deste projeto é realizar atividades de pesquisa e desenvolvimento de alto impacto científico e de forte cunho tecnológico através do desenvolvimento de pesquisas na área de computação científica e sua aplicação a problemas oriundos da área médica. Em particular, neste projeto aborda-se a problemática de utilizar técnicas de assimilação de dados a fim de construir modelos computacionais do sistema cardiovascular humano individualizados a pacientes e/ou populações manifestando condições cardiovasculares específicas. As atividades propostas por este projeto estão dentro do contexto do Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Medicina Assistida por Computação Científica (INCT-MACC). Espera-se que os resultados alcançados com este trabalho venham a fornecer ferramentas robustas de modelagem e simulação para a criação de modelos individualizados que permitam prever, com alto grau de precisão, o estado hemodinâmico em pacientes específicos.

### **3 Destaques Científicos e Tecnológicos**

#### **3.1. Click-Covid: Uma ferramenta de informação (Tema 3)**

Projeto aprovado na chamada *Fast-Track for COVID-19 SCALAC!* do Supercomputador SDumont, tendo como objetivo a implementação de modelos matemáticos com diferentes características que, quando calibrados com dados das regiões de interesse, possam ser combinados de forma a melhorar a previsão dos efeitos da propagação da COVID-19 nessas regiões. A calibração e a seleção dos modelos serão feitas usando a metodologia Approximate Bayesian Computation (ABC). Com os melhores modelos selecionados pelo ABC pode-se então aplicar técnicas de combinação de modelos para aprimorar a capacidade de previsão. A calibração é um processo de alto custo computacional e de fundamental importância para a eficácia do funcionamento dos modelos. Porém, esse processo, considerando a alta quantidade de dados e o número de modelos a serem avaliados, demanda uma grande capacidade computacional, levando a um tempo grande de simulação. Dessa forma o uso do SDumont é de suma importância para obter-se previsões em um tempo razoável. O projeto conta com a participação de Renato Silva (LNCC/COMOD), Gustavo Libotte (Posdoc-PCI/LNCC) e um grupo de 8 alunos do final da graduação do curso de Física da UnB.

### 3.2. Modelos Compartimentais Generalizados para a COVID-19 (Tema 3)

Desenvolvemos modelos compartimentais generalizado do tipo SEIRD onde são consideradas medidas de distanciamento social para descrever a disseminação do COVID-19. Para a identificação dos parâmetros dos modelos e a quantificação das incertezas é aplicada uma estrutura bayesiana. Diferentes estratégias de relaxamento de medidas de distanciamento social tem sido investigadas para determinar quais estratégias são viáveis.

### 3.3. Extensão do método MHM para a equação de Helmholtz e os operadores de Darcy e Stokes: Estimativas a priori e a posteriori para elementos finitos em polítopos (Tema 1)

Desenvolvemos e analisamos matematicamente novos métodos de elementos finitos multi-escalas definidos em polígonos para o modelo de Darcy. Demonstramos condições suficientes para a existência e unicidade de solução, e provamos resultados de super-convergência colocando em evidência a influência das diferentes escalas de discretização nas taxas de convergência. Introduzimos o conceito de estimadores de erro a posteriori com múltiplas escalas aplicados as equações de Stokes/Brinkman. Demonstramos uma equivalência entre um novo estimador de erro multiescalas com respeito ao verdadeiro erro, induzindo um novo algoritmo de adaptação de espaços sem mudança da topologia da malha de primeiro nível (veja Fig. 1). Extendemos o método MHM para o modelo de ondas no domínio da frequência, com análise de erro a priori tendo o cuidado de explicitar a dependência das constantes com respeito ao número de ondas.

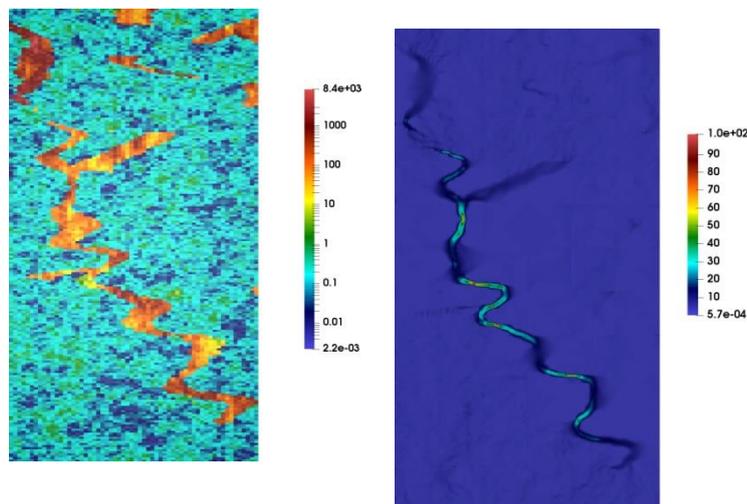


Figura 1: Campo de velocidade em meio poroso com adaptação de espaços via MHM.

### 3.4. Modelagem da COVID-19 com múltiplas gerações (Tema 3)

Usamos um modelo compartimental, do tipo suscetível, infectado, recuperado (SIR) com envolvendo múltiplas gerações para prever comportamentos futuros da doença. Com o mesmo modelo, conseguimos também investigar como políticas de vacinação.

Na Figura 2 apresentamos a previsão de casos (esquerda) e mortes (direita) acumulados usando os dados obtidos até o dia 200 (12 de setembro de 2020). Na Figura 3, apresentamos o número de reprodução  $R_t$  dividido por faixas etárias, i.e., quantos pessoas um infectado de determinada faixa etária pode contaminar (esquerda). Representamos também uma simulação fictícia de vacinação da população do Rio de Janeiro por faixas etárias (direita).

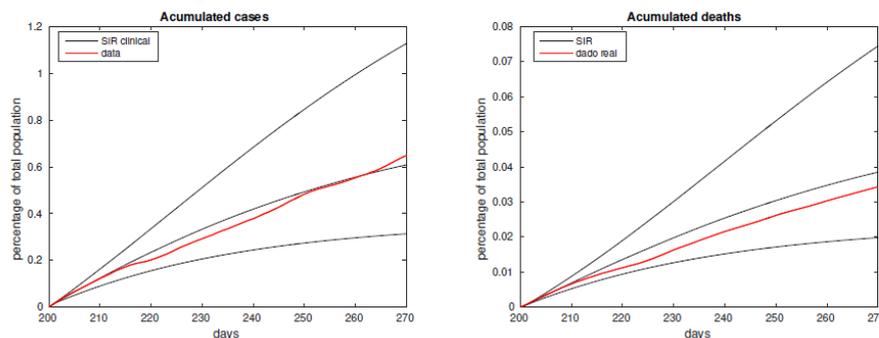


Figura 2: Previsões para o Estado do Rio de Janeiro (preto) e dados do Ministério da Saúde (vermelho)

### 3.5. Métodos numéricos para escoamento em tubulações (Tema 4)

Desenvolvemos técnicas de quantificação de incertezas eficientes para a simulação do escoamento sanguíneo em redes vasculares. A contribuição foi a combinação de um método eficiente de resolução numérica para as equações de Navier-Stokes desenvolvido pelo grupo e denominado *Transversally Enriched Pipe Element Method* (TEPEM) com técnicas de decomposição de domínios formuladas sobre o problema de cálculo dos coeficientes da expansão *polynomial chaos*. O processo de quantificação de incertezas requer a avaliação de diversas instâncias do problema em questão, com diferentes condições de contorno (fonte das incertezas). Em vez de particionar cada uma das instâncias individuais, a estratégia consiste em resolver o problema do cálculo dos coeficientes utilizando o conceito de decomposição de domínios. Dessa forma, cada instância é resolvida em um subdomínio (empregando TEPEM) sob condições de contorno (inter-domínio) específicas, as quais são definidas pelo algoritmo de quantificação de incertezas. A Figura 4 ilustra a utilização do método para estimar valor médio, desvio padrão e coeficiente de variação em quantidades de interesse hemodinâmico dentro de uma rede de vasos correspondente à vasculatura cerebral, incluindo as fontes de incertezas em todas as fronteiras do domínio.

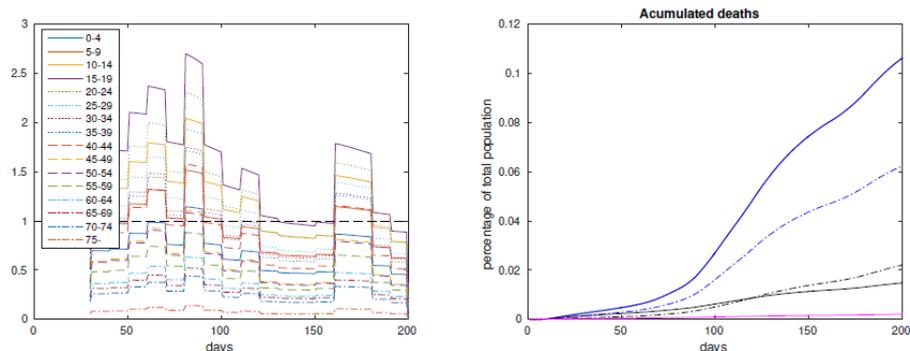


Figura 3: Estimativa do número de reprodução por faixa etária para a cidade do Rio de Janeiro (esquerda), e simulação fictícia da evolução da doença na Cidade do Rio de Janeiro caso a vacina fosse aplicada no início de março de 2020. Em azul contínuo representa a evolução da doença sem vacinas; em azul tracejado representa o caso de vacinar a população acima de 60 anos; em preto tracejado vacinando a população na faixa etária 40–59; preto contínuo os entre 15–20; em magenta os entre 20–39

### 3.6. Análise computacional em hemodiálise e modelos constitutivos dependentes de proteínas (Tema 6)

Análise de extensão da faixa de ângulos de anastomose para aplicações em fistulas rádio-cefálicas em hemodiálise através de padrões de escoamento e índice de oscilações de tensões cisalhantes em parede de vasos, com sucesso (apresentado no International Congress on Rheology, 2020.)

Análise de dependência reológica do sangue através de modelo constitutivo original, proposto para acomodar dependência de proteínas céricas, determinando importante relação com diâmetro de vasos. (ICR-2020)

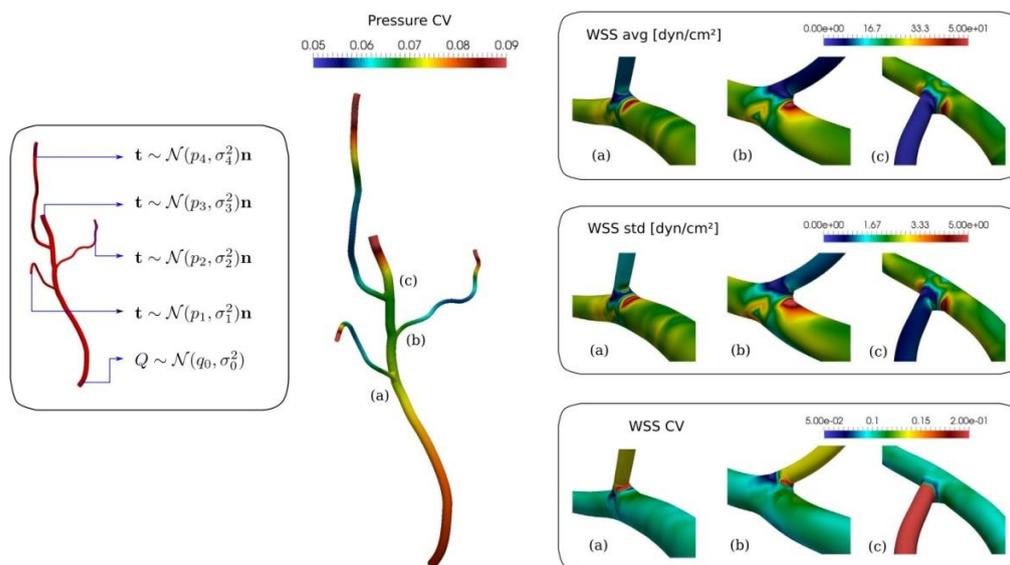


Figura 4: Artérias do cérebro com incertezas nas condições de contorno em todas as fronteiras de saída de fluxo. Valores médio (avg), desvio padrão (std) e coeficiente de variação (CV) da tensão de cisalhamento (WSS) e coeficiente de variação da pressão.

## 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- R. Araya, R. Rebolledo, and F. Valentin. On a multiscale a posteriori error estimator for the Stokes and Brinkman equations. to appear in
- IMA Journal of Numerical Analysis. <https://doi.org/10.1093/imanum/drz053>.
- G. Barrenechea, F. Jaiilet, D. Paredes, and F. Valentin. The multiscale hybrid mixed method in general polygonal meshes. *Numer. Math.*, 145:197–237, 2020.
- T. Chaumont-Frelet and F. Valentin. A multiscale hybrid-mixed method for the Helmholtz equation in heterogeneous domains. *SIAM J. Numer. Anal.*, 58(2):1029–1067, 2020.
- Jemy A. Mandujano Valle, Alexandre L. Madureira, Antonio Leitão, A Computational Approach for the inverse problem of neuronal conductances determination, *Journal of Computational neuroscience* 48, p. 281-297, 2020.
- Guzzetti, S; Mansilla Alvarez, LA; Blanco, PJ; Carlberg, KT; Veneziani, A. Propagating uncertainties in large-scale hemodynamics models via network uncertainty quantification and reduced-order modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 358, p. 112626, 2020.
- Thiago O. Quinelato, Abimael F. D. Loula, Maicon R. Correa, Todd Arbogast. Full H(div)-approximation of linear elasticity on quadrilateral meshes based on ABF finite elements, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 347, pp. 120-142, 2019.
- A.A.S. Amad, A.A. Novotny & B.B. Guzina. On the full-waveform inversion of seismic moment tensors, *International Journal of Solids and Structures*, 202(1):717-728, 2020.
- L. Fernandez, A.A. Novotny, R. Prakash & J. Sokolowski. Pollution sources reconstruction based on the topological derivative method. *Applied Mathematics & Optimization*, 2020.
- Moesia B., M., Karam F., J. and Giraldo, G., Domain Extensions of Binomial Numbers Applying Successive Sums Transformations on Sequences Indexed by Integers, *TEMA - Trends in Applied and Computational Mathematics*, V. 21, N. 1, pp.133-155, 2020.
- Carneiro I., Borges, M. and Malta, S., Numerical Simulation of Two-Phase Flows in Heterogeneous Porous Media, *TEMA - Trends in Applied and Computational Mathematics*, V. 21, N. 2, pp.339-358, 2020.
- Bernardo Martins Rocha, Rodrigo Weber dos Santos, Iury Igreja, Abimael F. D. Loula. Stabilized hybrid discontinuous Galerkin finite element method for the cardiac monodomain equation, *Int J Numer Meth Biomed Engng*. 36:e3341, 2020.

### 4.2. Livros e Capítulos de Livros

- A.A. Novotny & J. Sokolowski. *An Introduction to the Topological Derivative Method*. Springer Briefs in Mathematics. Springer Nature, Switzerland, 2020.
- E.O. Toroco, P. Blanco and R. Feijó, *Introduction to the Variational Formulation in Mechanics: Fundamentals and Applications*, Wiley, 2020.
- J. Karam-Filho, *Capítulo de livro, Fundamentos de Modelagem*, J. Analista Cognitivo (ed. EDUFBA), 2020.

- L. A. Medeiros, S.M.C. Malta, Introdução aos Métodos Variacionais, NoMA - Notas em Matemática Aplicada (ed. SBMAC), Vol. 87, 2020.

#### 4.3. Participação em Eventos Científicos

- Madureira, A., Sarkis, M., Robust Model Reduction Discretizations Based on Adaptive BDDC Techniques. In Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XXV. Lecture Notes in Computational Science and Engineering 158. pp. 41–52, 2020.
- Andrade, A. A. S. ; Silva, G. D. ; Kloh, V. P. ; Karam-Filho, J. . Modelagem Epidemiológica da Dispersão da Tuberculose Pulmonar. In: XIII Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional, Petrópolis, V 1. pp. 8-17., 2020.
- Moesia, M., Karam-Filho, J., Giraldo, G., Representação e Extensão dos Números Hiperpiramidais Através das Transformadas pela Soma Sucessivas. In Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics. São Paulo: SBMAC V. 7. pp. 010278-1-010278-2, 2020.
- Bortoloti, M.A., Karam-Filho, J., Computational analysis for Walburn- Schneck blood model with diameter dependence in stenotic vessels, Proceedings of the XVIII- International Congress on Rheology, p. 085, 12-17 dez, Rio de Janeiro, 2020.
- Andrade, J., Borges, C.H., Karam-Filho, J., Computational Analysis of Oscillatory Wall Shear Stress for Hematocrit Dependent Blood Rheological Model in Fistulae for Hemodialysis, Proceedings of the XVIII- International Congress on Rheology, p 084, 12-17 dez, Rio de Janeiro, 2020.
- Santos, J.D.B. and Loula, A.F.D. A Stabilized hybrid finite element formulation for the elastic wave equation, CILAMCE 2020.
- Ledoino, I.S and Loula, A.F.D. Primal HDG Methods for Elliptic Problems on Curved Meshes, CILAMCE 2020.
- Ledoino, I.S and Loula, A.F.D., Primal hybrid methods for elliptic problems on curved meshes, WCCM 2020.

#### 4.4. Palestras à Convite

- Alexandre L. Madureira, Modelagem epidemiológica da COVID-19 por um modelo SIR multigeracional, LNCC.
- Alexandre L. Madureira, Matemática Aplicada: Modelando a COVID- 19, Departamento de Matemática, UFPA-PA.
- Alexandre L. Madureira, Departamento de Matemática, Modelando a COVID-19: uma modesta proposta, UFSC-SC.
- Abimael F. D. Loula. Stabilized hybrid DGFEM naturally coupling Stokes and Darcy flows, Sixth China Brazil Conference on Scientific Computing, Shanghai, China, 2019.
- Sandra M. C. Malta, Seminários UFF/UFRJ
- Karam-Filho, J., "Análise Cognitiva: Fundamentos de Modelagem", Congresso de Difusão do Conhecimento - 2020, UFBA Realizado Remotamente, 21 a 27/10/2020.

- Karam-Filho, J., "Novos Espaços para Ocupar o Vazio", palestra e mesa temática. Congresso de Difusão do Conhecimento - 2020, UFBA Realizado Remotamente, 21 a 27/10/2020.
- Frederic Valentin, "The Origin of the Multiscale Hybrid-Mixed Method: An Overview", Seminário do LNCC 40 anos, 23/11/2020.

#### **4.5. Dissertações e Teses Defendidas**

- Jorge Morvan Marotte Luz Filho, Dissertação de Mestrado, Análise de Sensibilidade Topológica no Fraturamento Hidráulico, André Novotny, Márcio Murad e Marcel Xavier.
- Martha H. Timoteo Sanchez, Tese de Doutorado, Análise Numérica de métodos de elementos finitos para a equação da onda no domínio da frequência, Abimael Loula.

#### **4.6. Participação como Membro em Comissões Nacionais/Internacionais ou Corpo Editorial**

- Frédéric Valentin. Membro do Comité Assessor do CNPq na área de matemática/probabilidade e estatística. Período 2017-2020. Participação no Grupo de Trabalho do CNPq para propor novas regras de avaliação do CA-MA. Editor associado da *Journal Computational and Applied Mathematics*, Springer.
- André Novotny. Membro do corpo editorial do *Latin American Journal of Solids and Structures* e do *Control and Cybernetics* da Academia Polonesa de Ciências.
- Alexandre L. Madureira. Member of the scientific committee for the Brazilian meeting ENAMA, on mathematical analysis and its applications (2014- ); Associate editor of the *International Journal of Computer Mathematics* (2012- ); Associate editor of the *Journal TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC* (2012- 2020).
- Sandra M. C. Malta. Membro do Conselho da SBMAC (2018-2021) e Editora-Chefe da *NoMA-Notas em Matemática Aplicada* (2020-presente)
- Abimael F. D. Loula. Editor associado da *Journal Computational and Applied Mathematics*, Springer.
- Pablo J. Blanco. Editor associado do *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley.
- Karam-Filho, J., Conselheiro da Sociedade Brasileira de Reologia (BSR) (2015- atual); Membro Emérito da Associação Brasileira de Ciências Mecânicas (ABCM) (desde 2007); Membro do Corpo editorial da *Revista REUCP* (2013-atual); Membro titular do Colegiado do Programa de Doutorado Multiinstitucional de Modelagem do Conhecimento DMMDC (2019-atual).

#### **4.7. Prêmios e Honrarias**

- Frédéric Valentin. Inria International Chair. Período 2018-2023;
- Pablo Blanco. Aprovação de bolsa em Produtividade do CNPq nível 1C. Período 2020-2023;

## 5 Impactos da pesquisa na sociedade

- Entendimento de como dados demográficos como envelhecimento da população afeta decisões de tempo de estudo, salário, aposentadoria e poupança agregada.
- Modelagem da evolução da pandemia relacionada à COVID-19 usando modelos SIR com múltiplas gerações. Previsão do desenvolvimento da pandemia. Desenvolvimento de estratégias ótimas de vacinação.
- Pablo J. Blanco participou na Semana Nacional de Ciência e Tecnologia através de uma mesa redonda discutindo os desafios do núcleo de inteligência artificial do LNCC.

## 6 Atividades Projetadas para 2021

- Tema 1:
  - Continuação do desenvolvimento e análise numérica do método MHM e seus derivados;
    - \* Aplicação dos métodos MHM a modelos de propagação de ondas em nano-estruturas dentro da temática incluída na INRIA International Chair;
    - \* Desenvolvimento, análise e implementação de estimadores de erro a posteriori para modelos de fluidos com advecção dominante baseados nos métodos MHM, dentro da colaboração com a Universidad de Concepcion, Chile;
    - \* Propor equivalências entre o método MHM e o método HHO proposto por A. Ern e co-autores;
    - \* Proposta de um novo método multi-escalas ( $MH^2M$ ) contendo dois níveis de hibridização.
  - Submissão de uma nova proposta Math/Amsud com financiamento do CAPES e Inria/França visando a manutenção da colaboração com o Inria/França e UDEC/Chile;
  - Visita científica de longa duração do Frédéric Valentin ao INRIA Sophia-Antipolis dentro do Programa Inria International Chair;
  - Continuação do desenvolvimento da análise numérica do método DD (Dynamic Diffusion) visando a obtenção das *taxas ótimas* obtidas para os casos de convecção e difusão dominantes.
- Tema 2:
  - Dar continuidade ao desenvolvimento teórico e aplicações do conceito de derivada topológica na resolução de outras classes de problemas inversos.
- Tema 3
  - Desenvolver modelos macroeconômicos baseados em aspectos demográficos a fim de investigar influência de aposentadoria e investimentos em educação no desenvolvimento econômico. Explorar aplicações do tipo mean field game para estudar desigualdades econômicas, e desenvolver métodos numéricos para esta classe de equações. Desenvolver modelos epidemiológicos que levem em conta aspectos geo-espaciais.
  - Desenvolver novos modelos (extensões/simplificações - família de modelos) e de procedimentos sistemáticos de seleção de modelos. Tratar dos problemas de identificabilidade dos dados. Extensão para heterogeneidade espacial: modelagem de metapopulações e em redes complexas.

- Tema 4
  - Continuar a desenvolver técnicas numéricas eficientes para simular escoamentos em tubos com ênfase no fenômenos de interação fluido-estrutura
  - Investigar a utilização dos métodos desenvolvidos em aplicações clínicas
  
- Tema 5:
  - Extensão das análises bem sucedidas para anastomose em aplicações em fistulas rádio-cefálicas em hemodiálise através de padrões de escoamento e índice de oscilações de tensões cisalhantes, agora para fístulas maduras.
  - Extensão das análises de dependência reológica do sangue através do modelo constitutivo proposto com dependência para mais duas proteínas céricas e sua dependência com hematócrito e diâmetro de vasos.
  
- Tema 6:
  - Continuar participação do LNCC no Programa Multi-institucional de Doutorado em Difusão do Conhecimento com análise de processo de cognição e influência de redes colaborativas de pesquisa.



# IPES

INNOVATIVE PARALLEL FINITE ELEMENT SOLVERS



***Antônio Tadeu Azevedo Gomes***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O grupo de Pesquisa IPES objetiva desenvolver, analisar e validar novos modelos e métodos numéricos multiescalas através de modernas técnicas e estratégias matemáticas e computacionais para uso em arquiteturas massivamente paralelas, contribuindo para o desenvolvimento de pesquisas científicas de ponta e na formação de recursos humanos com caráter fortemente multidisciplinar.

## 1. Grupo de Pesquisa

### 1.1. Equipe

#### 1.1.1. Pesquisadores

- Membros da COMAC: Antônio Tadeu Gomes, Alexandre Madureira e Frédéric Valentin
- Membros da COTIC: Roberto Souto

#### 1.1.2. Alunos e pós-Doutores

- Pós-Doutores: Wesley Pereira (LNCC)
- Doutorandos: Juan Leonardo Fábian (LNCC), Larissa Martins (LNCC), Larissa Miguez (LNCC)
- Mestrandos: Franklin Da Conceição De Barros (LNCC)
- Bolsistas de projeto: Mateus Silva de Melo, Aaron Leão, Lucas Prett

#### 1.1.3. Pesquisadores Colaboradores

- Pesquisadores Nacionais: Henrique Versieux (UFMG), Honório Fernando (UFF), Sonia Gomes, Philippe Devloo (UNICAMP)
- Pesquisadores Estrangeiros: Rodolfo Araya, Diego Paredes (Universidad de Concepción, Chile), Stephane Lanteri, Claire Scheid, Théophile Chaumont (Inria, França) e Gabriel Barrenechea (University of Strathclyde, UK), Christopher Harder (MsDenver, USA), Fabrice Jaillet (IUTLyon, França), Jean-François Méhaut (LIG-UGA, França), Marcus Sarkis (WPI, EUA)

### 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- Tema 1: *MHM - Multiscale Hybrid-Mixed Methods*: A modelagem do conceito de múltiplas escalas através de equações diferenciais parciais e o desenvolvimento de métodos numéricos adaptados a sua resolução permeiam diferentes áreas do conhecimento. Neste contexto, propomos um nova família de métodos multi-escalas para problemas da mecânica dos fluidos como escoamentos turbulentos ou em meios porosos, problemas da mecânica dos sólidos representados por materiais heterogêneos, propagação de ondas em problemas de sísmica ou ainda problemas singularmente perturbados comuns nas áreas da física e da biologia.
- Tema 2: *Productivity and Efficiency in Finite Element Solvers*: A habilidade dos desenvolvedores de empregar eficientemente os recursos computacionais das plataformas de HPC atuais e a surgir na construção das aplicações científicas é pelo menos tão importante quanto o aumento da capacidade computacional dessas plataformas ou de métodos numéricos inovadores. Não menos relevante, contudo, é a facilidade com que esses desenvolvedores podem construir e manter essas aplicações:  
  
é inimaginável que tais desenvolvedores sejam expostos diretamente a complexidade inerente dessas plataformas. Neste contexto, propomos a

investigação e o emprego de técnicas de desenvolvimento de software técnico e científica com qualidade e produtividade, como prototipagem rápida, configuração automática e desenvolvimento dirigido por modelos de software, no contexto específica de simuladores numéricos baseados em elementos finitos, como os baseados nos métodos MHM.

- Tema 3: *Métodos Localizados*: Propomos desenvolver e implementar métodos de elementos finitos *localizados*. Este tipo de método permite, através de condensações estáticas *quasi-locais* reduzir o tamanho dos sistemas globais de métodos hibridizáveis, aumentando a eficiência computacional.

### 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - Análise Numérica de Elementos Finitos
  - Arquitetura, Projeto e Implementação de Sistemas de Software
  - Estrutura de Dados
  - Algoritmos
- Mini-cursos / Escolas / Congressos
  - MC-A - Métodos Multiescalas: Teoria e Prática (Escola de Verão do LNCC - Março de 2020)

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Métodos Multi-Escalas: Uma Abordagem Precisa e Realista para a Simulação de Escoamentos Complexos

- Vigência: 01/02/2013 - 01/02/2021
- Financiamento: Produtividade Pesquisa - CNPQ. No. 301576/2013-0
- Resumo: Este projeto pretende desenvolver e analisar matematicamente novos métodos de elementos finitos multiescalas e estimadores de erro a posteriori para problemas com coeficientes altamente heterogêneos e/ou singularmente perturbados.

### 2.2. PADEF - Paralelização e Análise de Acurácia, Desempenho e Aplicabilidade de Simuladores baseados em Elementos Finitos

- Vigência: 29/06/2018 - 28/12/2020
- Financiamento: CENPES
- Resumo: O objetivo principal do projeto é avaliar e ampliar a aplicabilidade de simuladores numéricos legados, seja em termos dos tipos de problemas físicos (tipos de EDPs) que os mesmos são capazes de resolver e do tamanho desses problemas (em termos de complexidade computacional), seja em termos de sua integração com outros sistemas, seja em termos de sua incorporação no contexto da nova família de métodos de elementos finitos os multiescala MHM.

### 2.3. Desenvolvimento e análise de métodos de elementos finitos híbridos de alto desempenho

- Vigência: 01/03/2019 - 28/02/2022
- Financiamento: CNPq
- Resumo: O objetivo é desenvolver e analisar métodos de elementos finitos do tipo híbrido para aproximações de certas Equações Diferenciais Parciais (EDPs) elípticas. As EDPs a serem investigadas apresentam características que dificultam ou mesmo impossibilitam boas aproximações via métodos clássicos. Os métodos a serem investigados são adequados a computação de alto desempenho. O interesse é que os métodos aproximem soluções de EDPs exigindo regularidade mínima e na presença de alto contraste. A primeira classe de método baseia-se em decomposições espectrais localizadas. A segunda classe envolve o desenvolvimento e análise de novos métodos de elementos finitos multiescalas “duplamente híbridos”

## 3. Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1. Novos métodos MHM para elementos poligonais aplicados a modelos de elasticidade em meios altamente heterogêneos

- Resumo: Propusemos uma nova família de elementos finitos poligonais para o método MHM aplicado ao modelo de elasticidade linear em problemas bi- e tridimensionais. Estendemos a construção e a análise do método MHM proposto em outros trabalhos que abordavam tais problemas somente com elementos finitos simplex. Provamos convergência ótima na norma  $L^2$  usando tais elementos finitos poligonais. Também abordamos aspectos computacionais dessa nova família de métodos, implementada em paralelo com diferentes configurações, e ilustramos por meio de experimentos como balancear tempo de execução e consumo de memória na busca por uma certa ordem de aproximação. Este trabalho está disponível em *preprint* ([1]) e foi recentemente submetido para a *SIAM Journal on Numerical Analysis*.

### 3.2. Suporte a métodos iterativos paralelos no MHM

- Resumo: Estendemos o conjunto de bibliotecas `msl_core`, `msl_cg`, `msl_mhm` para suporte a métodos iterativos na resolução dos sistemas lineares esparsos gerados pelo método MHM, tanto nos problemas locais como no problema global, empregando a biblioteca `AztecOO` da suíte `Trilinos` (<https://trilinos.github.io>). Também experimentamos, como parte do projeto `PADEF`, o uso de simuladores numéricos legados no nível dos problemas locais MHM, baseados em uma biblioteca desenvolvida pelo CENPES em parceria com o Laboratório LAMEMO da COPPE/UFRJ. Desse modo, expandimos nossa capacidade de resolver problemas de alta complexidade computacional associados a uma grande variedade de modelos.

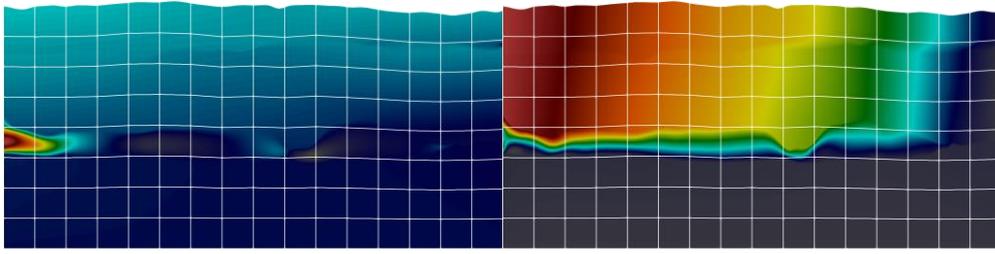


Figura 1: Componentes  $u_x$  e  $u_z$  de deslocamento obtidas para um modelo de elasticidade linear com o método MHM em um domínio com deslocamento nulo na fronteira inferior e com tração nula nas demais fronteiras. O domínio é dividido em 16 camadas segundo o benchmark HPC4e [2], com as camadas 4 e 12 contendo argila saturada e as demais camadas preenchidas com o material original do benchmark. A fonte é o peso constante por partes, usando aceleração da gravidade de  $9.8m/s^2$ . A malha usada é retangular grossa em todo o domínio (nota-se como as camadas “atravessam” os elementos da malha grossa), exceto na fronteira superior, onde elementos com em média 35 arestas são usados para capturar a topografia.

#### 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

- Gomes, A.T.A.; Molion, E.; Souto, R.P.; Méhaut, J.F. Memory allocation anomalies in high-performance computing applications: A study with numerical simulations. CONCURRENCY AND COMPUTATION- PRACTICE & EXPERIENCE. p.e6094 - , 2020.
- Araya, R.; Rebolledo, R.; Valentin, F. On a multiscale a posteriori error estimator for the stokes and brinkman equations. To appear in IMA Journal of Numerical Analysis.
- Barrenechea, G.; Jaillot, F.; Paredes, D.; Valentin, F. The multiscale hybrid mixed method in general polygonal meshes. Numer. Math., 145:197–237, 2020.
- Chaumont-Frelet, T.; Valentin, F. A multiscale hybrid-mixed method for the helmholtz equation in heterogeneous domains. SIAM J. Numer. Anal., 58(2):1029–1067, 2020.

##### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- Gomes, A.T.A.; Molion, E.; Souto, R.P.; Méhaut, J.F. Memory allocation anomalies in high-performance computing applications: A study with numerical simulations. CONCURRENCY AND COMPUTATION- PRACTICE & EXPERIENCE. p.e6094 - , 2020.
- Araya, R.; Rebolledo, R.; Valentin, F. On a multiscale a posteriori error estimator for the stokes and brinkman equations. To appear in IMA Journal of Numerical Analysis.
- Barrenechea, G.; Jaillot, F.; Paredes, D.; Valentin, F. The multiscale hybrid mixed method in general polygonal meshes. Numer. Math., 145:197–237, 2020.
- Chaumont-Frelet, T.; Valentin, F. A multiscale hybrid-mixed method for the helmholtz equation in heterogeneous domains. SIAM J. Numer. Anal., 58(2):1029–1067, 2020.

#### **4.2. Artigos em Anais de Eventos**

- Madureira, A., Sarkis, M., Robust Model Reduction Discretizations Based on Adaptive BDDC Techniques. In Domain Decomposition Methods in Science and Engineering XXV. Lecture Notes in Computational Science and Engineering 158. pp. 41–52, 2020.
- FABIAN, J. H. L. ; GOMES, A. T. A. ; OGASAWARA, E. Estimating the execution time of the coupled stage in multiscale numerical simulations. In: Latin America High Performance Computing Conference (CARLA), 2020, Cuenca, EQ. Proceedings of the 7th Latin America High Performance Computing Conference (CARLA2020), 2020.
- FABIAN, J. H. L. ; GOMES, A. T. A. ; OGASAWARA, E. Estimating the execution time of fully-online multiscale numerical simulations. In: Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho (WSCAD), 2020, Santo André, SP. Anais do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho (WSCAD2020). Porto Alegre, RS: SBC, 2020.

#### **4.3. Palestras a Convite**

- Antônio Tadeu Gomes, “Developing scientific software with quality and productivity: a 15-year endeavor”, Seminário do LNCC 40 anos, 06/07/2020.
- Frédéric Valentin, “The Origin of the Multiscale Hybrid-Mixed Method: An Overview”, Seminário do LNCC 40 anos, 23/11/2020.

#### **4.4. Desenvolvimento de Programas e Produtos**

- msl core, msl\_cg, msl\_mhm: the MHM Set of Libraries for the development of multiscale finite element simulators – disponível mediante solicitação em <https://gitlab.com>

#### **4.5. Participação como Membro em Comissões Nacionais/Internacionais ou Corpo Editorial**

- Frédéric Valentin. Membro do Comitê Assessor do CNPq na área de matemática/estatística. Período 2017-2020. Período 2018-2019. Editor associado da *Journal Computational and Applied Mathematics*, Springer.
- Alexandre L. Madureira. Member of the scientific committee for the Brazilian meeting ENAMA, on mathematical analysis and its applications (2014-); Chief-editor of the book series *Notas em Matemática Aplicada* (2015-); Associate editor of the *International Journal of Computer Mathematics* (2012-); Associate editor of the *Journal TEMA - Tendências em Matemática Aplicada e Computacional - SBMAC* (2012).
- Antônio Tadeu A. Gomes. Chair do Comitê de Programa do Simpósio Brasileiro de Sistemas Computacionais de Alto Desempenho (WSCAD 2020), ocorrido este ano de forma virtual devido à pandemia da COVID-19.

#### **4.6. Prêmios**

- Frédéric Valentin. Inria International Chair. Período 2018-2023.

### **5. Atividades Projetadas para 2021**

- Temas 1 e 2:
  - Continuação da implementação do método MHM na biblioteca MSL;

- Proposta de cursos novos sobre o método MHM do ponto de vista prático e teórico;
- Desenvolvimento, análise e implementação de estimadores de erro a posteriori para modelos de fl baseados nos métodos MHM, dentro da colaboração com a Universidad de Concepcion, Chile;
- Visita científica de longa duração do Frédéric Valentin ao INRIA Sophia-Antipolis dentro do Programa Inria International Chair;
- Submissão de proposta de continuação do projeto PADEF, com financiamento do CENPES, visando aplicação dos métodos MHM a problemas de interesse da área de Óleo e Gás.

## 6. Outras Informações Relevantes

Nada a declarar.

### Referências

- [1] A. T. A. Gomes, W. S. Pereira, and F. Valentin, *The MHM Method for Elasticity on Polytopal Meshes*. working paper or preprint, Sept. 2020.
- [2] J. de la Puente, *HPC4E Seismic Test Suite*. <https://hpc4e.eu/downloads/datasets-and-software>, 2016. Copyright Josep de la Puente (Barcelona Supercomputing Center) 2016. Licenced under the Creative-Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License.



# MIE

MODELAGEM DE INCERTEZAS EPISTÊMICAS



**Renato Simões Silva**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

As simulações numéricas de problemas de engenharia vêm acompanhadas de incertezas e erros. Estas características são muitas vezes agravadas pela precariedade ou ausência das informações necessárias para caracterizar a fenomenologia.

O tratamento de incertezas envolve três etapas essenciais:

- Obtenção e tratamento das informações relevantes;
- Escolha do modelo físico que representa o problema;
- Escolha do modelo matemático que representa as incertezas que se deseja modelar levando em consideração as informações disponíveis;
- Tratamento numérico do modelo matemático considerando-se as incertezas.

O objetivo deste projeto é estudar como estas incertezas podem ser determinadas e como inserir o conhecimento destes fatores nas simulações para obter soluções confiáveis inclusive considerando as incertezas na escolha do modelo físico/matemático.

## **1 Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Renato S. Silva (COMOD)

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

- Pos-Doutores:
- Doutorandos: Maurício Pessoa C. Menezes (coorientação com Regina Almeida)
- Mestrandos: João Vitor (coorientação com regina Almeida) - LNCC
- IC: Alunos do projeto Click Covid: Ferramenta de Informação Interativa - UNB (coorientação com: Sandra Malta e Gustavo Libotte - (PCI/LNCC))

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:
  - Regina C. Almeida - LNCC
  - Sandra M. C. Malta - LNCC
  - Gustavo Libotte - PCI / LNCC
- Internacionais:

### **1.2. Pesquisa e Desenvolvimento**

- Tema 1: Análise e Quantificação de Incertezas - Modelagem de Incertezas não probabilísticas em parâmetros e modelos utilizados em engenharia, nas áreas de transferência de calor e problemas de trans- porte. As técnicas utilizadas são: Análise Intervalar, Logica Fuzzy e Teoria da Evidência.
- Tema 2: Incrustação em trocadores de calor - Criação de modelos de incrustação que levem em conta transformações dos cristais da in- crustação.
- Tema 3: Metamodelos com foco em Gaussian Process - Uso de meta- modelos na calibração de modelos complexos
- Tema 4: Projeto Click Covid: Ferramenta de Informação Interativa - esse projeto tem como objetivo a implementação de modelos matemáticos com diferentes características que, quando calibrados com dados das regiões de interesse, possam ser combinados de forma a melhorar a previsão dos efeitos da propagação do vírus nessas regiões.
- Tema 5: Coleta de dados experimentais - Desenvolvimento de pequenos experimentos para obtenção de dados para permitir a aplicação das técnicas desenvolvidas e utilizadas no tema anterior, com baixo custo experimental. Atualmente são utilizados na disciplina GB500 - Calibração, Análise de Incertezas e Validação de Modelos Numéricos

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - GB500 - Calibração, Análise de Incertezas e Validação de Modelos Numéricos - LNCC
- Mini-cursos / Escolas / Congressos

## **2 Resultados Científicos e Tecnológicos**

### **Artigos Científicos em Periódicos**

- Gustavo B. Libotte, Lucas dos Anjos, Regina C. Almeida, Sandra M. C. Malta, Renato S. Silva. Enhancing the estimation of compartmental model parameters for COVID-19 data with a high level of uncertainty. (submetido para publicação no Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation)

## **3 Impactos da pesquisa na sociedade**

- Indústria: Os temas sobre modelos de incrustação e análise de incertezas, são pertinentes pois tem como objetivo auxiliar nas tomadas de decisões para que estas possam levar a economia de energia, redução de custos e aumento da segurança
- Área da Saúde: Projeto Projeto Click Covid eh uma ferramenta que tem como objetivo melhorar a predição de modelos epidemiológicos, podendo ser usado em varias doenças auxiliando na elaboração de politicas publicas.

## **4 Atividades Projetadas para 2021**

- submissão de artigos em periódicos indexados:
  - Fuzzy Model Combination for Crystalization Fouling (em fase final de escrita)
  - Bayesian inference using Gaussian Process surrogates in cancer modeling, H. L. Rocha, J. V. O. Silva, R. C. Almeida, and R. S. Silva
- Finalização do Projeto Click Covid



# LABINFO

LABORATÓRIO DE BIOINFORMÁTICA E  
UGCDFA - UNIDADE DE GENÔMICA COMPUTACIONAL DARCY FONTOURA DE ALMEIDA



**Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O LABINFO desenvolve pesquisas em Bioinformática e Biologia Computacional e utiliza a infraestrutura de processamento do LNCC, incluindo o supercomputador Santos Dumont. Está associado à Unidade de Genômica Computacional “Darcy Fontoura de Almeida” (UGCDFA), uma facility de sequenciamento de última geração. Devido a grande quantidade de dados gerados pelo sequenciamento em larga-escala de DNA, utiliza técnicas de Computação de Alto Desempenho e de metodologias nas áreas de Inteligência Artificial e Big Data que permite maior agilidade no processamento e análise dos dados gerados. Com experiência em Genômica, transcritômica, metagenômica, exoma, filogenômica, e pequenos RNAs desenvolve pesquisa nas áreas de saúde humana, animal, vegetal e em aplicações biotecnológicas. Destacamos, em 2020, a atuação do LABINFO no enfrentamento da pandemia da COVID-19. Os estudos de sequenciamento e análise de genoma do vírus e de amostras de pacientes acometidos pela COVID-19 estão sendo realizados em colaboração com instituições nacionais com as quais tivemos vários projetos aprovados.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores e tecnologistas**

Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos  
Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot  
Luciane Prioli Ciapina Guedes  
Luiz Gonzaga Paula de Almeida  
Marisa Fabiana Nicolás

#### **1.1.2. Analistas e técnicos de laboratório**

Alexandra Lehmkuhl Gerber  
Ana Paula C. Guimarães  
Eduardo Wagner da Silva David  
Éllen dos Santos Correa  
Rangel Celso Souza  
Vinícius Prata Kloh

#### **1.1.3. Suporte administrativo e financeiro**

Natália Fernandes Aquino

#### **1.1.4. Alunos e pós-Doutores**

- Pós-Doutores:

1. Yasmmin Côrtes Martins. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
2. Leandro Nascimento Lemos. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
3. Fabiola Marques de Carvalho. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
4. Cristina dos Santos Ferreira. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
5. Bruno Zonovelli da Silva. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica.
6. Guilherme Cordenonsi da Fonseca. Início: 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
7. Otávio José Bernardes Brustolini. Início: 2019. Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos)
8. Guadalupe Del Rosario Quispe Saji. Início: 2018. Laboratório Nacional de Computação Científica, Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ.
9. Rangeline de Azevedo da Silva. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.

10. Victor Octavio Borda Pua. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.
11. Marbella Maria Bernardes da Fonseca. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.
12. Liliane Tavares de Faria Cavalcante. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.
13. Luciano Takeshi Kishi. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, . Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.
14. Rafael de Oliveira Schneider. 2020. Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos.
15. Maiana de Oliveira Cerqueira e Costa. 2019. Laboratório Nacional de Computação Científica, CNPQ-PCI. Marisa Fabiana Nicolás.

- Doutorandos:

1. Ronaldo da Silva Francisco Junior. Análise Transcriptômica Comparativa de Perfis de Expressão Alelo-Específica durante Infecções por Arbovírus em Tecidos Humanos Utilizando Dados de RNA-seq. Início: 2020. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas (Genética)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos).
2. Amanda Araújo Serrão de Andrade. Metagenômica aplicada a virologia clínica no descobrimento de novos arbovírus. Início: 2020. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas (Genética)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos).
3. Filipe Romero Rebelo Moreira. Vigilância Genômica de arboviroses circulantes no Brasil. Início: 2018. Tese (Doutorado em Ciências Biológicas (Genética)) - Universidade Federal do Rio de Janeiro. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos).
4. Vítor dos Santos Baía Ferreira. ANÁLISE METAGENÔMICA DAS COMUNIDADES DE MICRORGANISMOS DA BAÍA DO ALMIRANTADO E REGIÕES ADJACENTES, PENÍNSULA ANTÁRTICA. Início: 2019. Tese (Doutorado em Genética) - Universidade Federal do Rio de Janeiro. (Coorientador - Ana Tereza Vasconcelos).
5. Stephanny Miranda Alves de Souza. Caracterização Estrutural, Funcional e Desenvolvimento de Nanobiossistemas do Peptídeo Lunasina Aplicados a sua Efetivação Terapêutica Anticâncer. Início: 2020. Tese (Doutorado em Nanobiossistemas) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, campus Duque de Caxias. (Coorientador - Marisa Fabiana Nicolás).
6. Cristiano Nascimento Costa. Desenvolvimento e validação de metodologia para avaliação de substâncias ativas nanoestruturadas e não nanoestruturadas administradas via nanoinjeção em *Drosophila melanogaster*. Início: 2019. Tese (Doutorado em Nanobiossistemas) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, campus Duque de Caxias. (Coorientador - Marisa Fabiana Nicolás).

- Mestrandos:

1. Douglas Terra Machado. -. Início: 2019. Dissertação (Mestrado profissional em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador - Ana Tereza Vasconcelos).
2. Rafael de Souza Terra. Análise de redes filogenéticas de genes ancestrais por meio de árvores de regressão em ambientes de supercomputação. Início: 2020. Dissertação (Mestrado profissional em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Orientador - Kary Ocaña).
3. Leon Sulfierry Corrêa Costa. Avaliação do impacto das mutações não sinônimas na estrutura da proteína Nsp12 de SARS-CoV-2. (Mestrado em Modelagem Computacional) - Laboratório Nacional de Computação Científica, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. (Coorientador Marisa Fabiana Nicolás).
4. Juliana Simas Coutinho Barbosa. Dissertação defendida em julho de 2020 intitulada: "Genome-scale Reconstruction of the Metabolic Network iJS784 for *Acinetobacter baumannii* strain ATCC 17978 to Address Drug Target Prioritization" (Orientador Marisa Fabiana Nicolás).

- Iniciação Científica:

1. Guilherme Freire da Silva Dornelas. Desenvolvimento de módulos paralelo-híbrido de bioinformática para ambientes GPU de supercomputação. Início: 2019 - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador - Kary Ocaña).
2. Mayconn Luiz Bispo dos Santos. Gerência de Aplicações Científicas no Portal da Rede Nacional de Bioinformática (Bioinfo-Portal). Início: 2018 - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador - Kary Ocaña).
3. Lucas Silva. Exploração de Módulos Paralelo-Híbrido para Workflows de Bioinformática em Ambientes Supercomputação por meio do gerenciador de workflows Parsl. Início: 2020 - Laboratório Nacional de Computação Científica, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. (Orientador – Carla Osthoff, Coorientador Kary Ocaña)

- Bolsistas PCI:

1. Micaela Coelho. Bolsista PCI. Início: 2019 - Laboratório Nacional de Computação Científica. (Orientador Carla Osthoff, coorientador Kary Ocaña. Nível: Graduação).

## 1.2. Instituições Colaboradoras

- **Nacionais:**

1. Biomanguinhos - Fiocruz - RJ
2. Embrapa Soja – Laboratório de Biotecnologia do Solo
3. Embrapa Suínos e Aves
4. Faculdade de Medicina de São José do Rio Preto

5. FIOCRUZ / Bahia / Fortaleza/ Minas Gerais / Rio de Janeiro
6. Fundação Getúlio Vargas (FGV)
7. INMETRO
8. Instituto Adolfo Lutz
9. Instituto Fernandes Figueira - IFF - FIOCRUZ
10. Instituto Nacional de Pesquisa da Amazônia (INPA)
11. UFRJ/Campus Xerém
12. Universidade de Brasília
13. Universidade de São Paulo – Ribeirão Preto
14. Universidade de São Paulo – USP
15. Universidade Estadual de Campinas – Unicamp
16. Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro - UENF
17. Universidade Estadual do Rio de Janeiro – UERJ
18. Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho" - UNESP
19. Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG
20. Universidade Federal de Santa Catarina – UFSC
21. Universidade Federal de São Paulo – UNIFESP
22. Universidade Federal do Espírito Santo - UFES
23. Universidade Federal do Pará – UFPA
24. Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ
25. Universidade Federal do Rio Grande do Norte – UFRN
26. Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS
27. Universidade Federal do Tocantins
28. Universidade Federal Fluminense – UFF
29. Universidade FEEVALE

• **Internacionais:**

1. Beijing Institute of Genomics - BIG, China
2. Centre National de Référence des Staphylocoques - CIRI-HCL-CNR, França
3. Facultad de Ciencias Exáctas y Naturales - UBA, Argentina
4. Fondation Merieux – França
5. Geneva University Hospitals and School of Medicine, Service of Infectious Diseases - Geneva, Switzerland
6. Instituto Clemente Estable, Uruguai
7. Sorbonne Université - Paris, França
8. Universidad Autónoma de México - UNAM, México
9. Universidad Católica de Córdoba -UCC, Argentina
10. Université Lyon 1, França

**1.3. Pesquisa e Desenvolvimento**

Ver projetos de pesquisa (item 2)

## 1.4. Ensino/Formação de Recursos Humanos

### • Cursos de Pós-graduação

Disciplinas ministradas no Curso de Pós-graduação em Modelagem Computacional do LNCC (devido a pandemia, 05 disciplinas foram canceladas):

1. GA-016 – Introdução à Biologia Molecular
2. GB-203 – Introdução a Biologia Computacional e Bioinformática
3. GB-500 – Estatística aplicada à Bioinformática em R
4. GB-500 – Métodos de Análise Filogenética e Filogenômica
5. GA-047 – Banco de dados do ponto de vista biológico
6. GB-500 – Aprendizagem de Máquina e Reconhecimento de Padrões
7. GB-204 – Montagem de Genomas
8. GB-205 – Anotação de genomas
9. GB-500 – Análise de variantes genéticas (germinativas e somáticas) utilizando dados de sequenciamento de exoma

### • Organização de eventos

Workshop: GenoBio20 - 20 anos de Genômica e Bioinformática no Brasil. Organizado sob a coordenação do LABINFO tendo como membros do Comitê organizador outras instituições que atuam na área com o objetivo de celebrar os 20 anos de Genômica e Bioinformática no Brasil. O evento de forma presencial, com data para o período de 27 a 29 de abril de 2020, seria realizado no LNCC. No entanto, devido a pandemia o evento foi adiado e será realizado de forma online através do canal do Youtube da Sociedade Brasileira de Genética (SBG), no período de 12 a 14 de dezembro de 2020. O evento conta com a apresentação de debates com representantes da indústria com foco em genômica e bioinformática e com dirigentes de agências financiadoras e dos ministérios; conferências; painéis para discussões sobre os recursos humanos na área, avanços e impactos científicos, tecnológicos e econômicos da genômica e bioinformática no Brasil, as oportunidades e desafios, bem como o futuro dessas áreas diante do atual cenário de Educação, Ciência e Tecnologia no país. Ana Tereza Vasconcelos.

- Organização e Participação no evento da Marcha Virtual pela Ciência (SBPC) - [Marcha Virtual pela Ciência - Ana Tereza Vasconcelos \(LNCC\)](#)
- Organização da Marcha pela VIDA (SBPC) - [Frente pela Vida](#) Ana Tereza Vasconcelos.
- Organização do evento da Democracia e Vida e do dia Ciência (SBPC) - [Retransmissão - Painel "As Ciências e a Vida" e "As Ciências e a Democracia"](#) Ana Tereza Vasconcelos.
- Organização do evento: "Situação da Pandemia de COVID-19 na América"; Série de 3 Painéis com a participação de, ao todo, 19 países. Ana Tereza Vasconcelos. Links abaixo:  
1º Painel - 24/09/2020 - [1º Painel "Situação da Pandemia de COVID-19 na América"](#) 2ª Painel  
- 22/10/2020 - [2º Painel "Situação da pandemia da COVID-19 na América"](#) 3º Painel  
- 24/11/2020 - [3º Painel "Situação da pandemia da COVID-19 na América"](#)

## 2. Projetos de Pesquisa

### Sob coordenação do LABINFO

#### 1. Coalizão Multiômicas Covid-19 Brasil: componente sequenciamento do genoma do SARS-CoV-2

Descrição: O SARS-CoV-2 foi relatado pela primeira vez em dezembro de 2019 na cidade de Wuhan na China e em seguida o Diretor Geral da Organização Mundial da Saúde (OMS) decretou estado de emergência em saúde pública. Os dados disponíveis na literatura sobre a Covid-19 apresentam muitas contradições e existem ainda muitas lacunas de conhecimento a serem preenchidas. Embora esteja bem documentado que a doença represente um risco elevado para indivíduos idosos, sobretudo os do sexo masculino e que possuem alguma condição de saúde preexistente (tais como diabetes, doenças cardiovasculares e respiratórias), ela também tem sido associada a manifestação de quadros clínicos severos e óbitos em alguns adultos mais jovens. Por outro lado, à medida que mais testes em massa são realizados para Covid-19, os pesquisadores estão encontrando cada vez mais indivíduos assintomáticos ou que apresentam sintomas leves ou atípicos da doença. Embora fatores ambientais e de estilo de vida ainda não identificados possam contribuir para esses desfechos clínicos drasticamente diferentes, parece cada vez mais plausível que características intrínsecas do indivíduo (genômicas, transcritômicas, proteômicas, metabolômicas, imunológicas, entre outras) possuem uma forte contribuição em relação à manifestação clínica da Covid-19. São poucas ainda as evidências disponíveis na literatura sobre como se procede a interação das características individuais do hospedeiro em relação à infecção ocasionada pelo SARS-CoV-2 e quais dessas características podem conferir maior susceptibilidade ou proteção à infecção e ao desenvolvimento do quadro clínico. Cabe ainda destacar que a influência dos fatores individuais em relação à susceptibilidade, proteção e manifestação clínica da Covid-19 pode variar amplamente entre populações. Tal fato se faz especialmente relevante quando se trata da população brasileira devido ao seu elevado grau de miscigenação, resultando em um genoma mosaico composto por fragmentos de diferentes genomas subcontinentais (europeu, ameríndio, africano e asiático). Ademais, as disparidades socioeconômicas em nosso país geram uma maior variabilidade de exposição inter individual do que a de nações mais desenvolvidas, permitindo uma melhor exploração dos efeitos da interação gene-ambiente. Face a todo o exposto e considerando o estado de emergência de saúde pública global e pandemia decretado pela OMS, faz pungente uma melhor compreensão de como os fatores intrínsecos contribuem para a infecção do SARS-CoV-2 e o desenvolvimento do quadro clínico da Covid-19 na população brasileira.

Coordenador: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos / Gilberto Domond - Integrante / Mayana Zatz - Integrante / Lygia da Veiga Pereira - Integrante / Financiador(es): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico

#### 2. Corona-ômica - RJ: Plataforma computacional integrativa para caracterização de determinantes virais e do hospedeiro na COVID-19 utilizando abordagens ÔMICAS no estado do Rio de Janeiro. 2020 - Atual

Descrição: O objetivo deste projeto é identificar e caracterizar fatores genômicos virais e dos hospedeiros envolvidos na patogênese do COVID-19, associados às manifestações clínicas da doença através da integração de dados de ômica (genômica viral, metagenômica, exoma e transcritoma humanos) e técnicas de Inteligência Artificial. Os dados genômicos virais serão

utilizados em estudos de vigilância genômica através de reconstruções filogenéticas e filogeográficas para avaliar a dispersão de epidemia e identificação de “clusters” de transmissão. Os dados de exoma e RNA-Seq dos pacientes serão utilizados para identificação de marcadores prognósticos e possíveis alvos terapêuticos para fornecer suporte ao diagnóstico da COVID-19 com perspectivas de aplicação ao SUS. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Integrante / Caroline Moreira Voloch - Integrante / Cynthia Chester Cardoso - Integrante / Cíntia Barros Santos Rebouças - Integrante / Enrique Medina-Acosta - Integrante. Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro.

3. Inteligênciômica saúde: o uso de metodologias de inteligência artificial para identificação de preditores genéticos associados aos casos severos por arboviroses. 2020 - Atual

Descrição: O Brasil tem sofrido com diversas epidemias de arboviroses ao longo dos últimos séculos. Virozes como Zika, Febre Amarela, Chikungunya, Dengue, Oropouche e Mayaro são transmitidos por mosquitos vetores abundantes no Brasil. Através de estratégias de genômica viral, exoma, transcritômica e metagenômica serão analisadas amostras humanas e de primatas por meio de métodos de inteligência artificial (Deep Learning) com o objetivo de extrair conhecimento nos dados gerados. Além disso, a integração com metadados auxiliarão na identificação de possíveis fatores envolvidos na susceptibilidade aos casos mais severos de arboviroses. Trata-se de um projeto interdisciplinar envolvendo pesquisadores com conhecimento em diferentes áreas (bioinformática, bioestatística, matemática, médicos, virologistas, genética, biologia celular e neurocientistas) de diferentes instituições do Rio de Janeiro e nacionais na tentativa de identificar os fatores preditivos que expliquem a susceptibilidade de uma pequena proporção da população acometida por arboviroses em desenvolverem manifestações clínicas severas e fatais.

Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / TANURI, AMILCAR - Integrante / Roberto Andrade Medronho - Integrante.

Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro.

4. Sequenciamento de DNA e análises bioinformáticas para metagenômica – METAPETRO: 2019 - Atual

Descrição: Devido aos avanços nas tecnologias de sequenciamento de última geração e no desenvolvimento de novos algoritmos, softwares e ferramentas de bioinformática, análises mais robustas a partir da enorme quantidade de dados geradas, vem abrindo novos caminhos em estudos ambientais. A metagenômica consiste na análise, independente de cultivo, de genomas presentes em dado habitat. As informações obtidas a partir da análise de metagenomas podem ser usadas para determinar a diversidade de uma comunidade, a presença de microrganismos específicos ou dominantes, rotas metabólicas, bem como determinar a simples presença de um gene. O presente projeto tem como objetivo principal realizar estudos ambientais em áreas influenciadas pela indústria do petróleo através de estudos metagenômicos. De acordo com os interesses da indústria de óleo e gás e disponibilidade qualitativa e quantitativa das amostras serão realizadas análises metagenômicas que permitirão acessar o perfil taxonômico, funcional e metabólico dos ambientes estudados, realizar estudos comparativos entre as comunidades, bem como buscar produtos gênicos de interesse biotecnológico. Esse conhecimento poderá ser útil para o desenvolvimento de medidas de intervenção nos processos, visando redução de custos e

aumento da produção. Além disso, será útil para avaliação da degradação do ambiente e proposição de medidas de recomposição dos ecossistemas degradados. Termo de cooperação nº 5900.0109896.18.9. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Almeida, Luiz G. P. - Integrante / Alexandra L. Gerber - Integrante / Ana Paula Guimarães - Integrante / Ciapina, Luciane Prioli - Integrante / Luciano Takeshi Kishi - Integrante. Financiador(es): PETROBRAS - Auxílio financeiro.

#### 5. Genômica Computacional do Vírus da Zika (ZIKV) - 2016 - Atual

Descrição: Este projeto pretende investigar a interação do microorganismo-hospedeiro (SAIZIKA) através do sequenciamento de cultivos (primários ou linhagens estabelecidas) de células humanas de diferentes tecidos considerados como alvos potenciais de infecção, incluindo neurônios/neuroblastos, células de Schwann, trofoblasto, queratinócitos, fibroblastos, epiteliais tímicas e células- tronco de sangue de cordão, seguidas por análises de bioinformática. Para isso, realizaremos uma análise comparativa do transcrito humano em cultivos celulares de amostras sadias e infectadas pelo ZIKV. Nessa etapa, pretende-se identificar e caracterizar as funções biológicas e vias metabólicas dos genes humanos diferencialmente expressos e que estejam envolvidos na padronização do neuro-eixo e malformações encefálicas. Convênio FINEP - nº 01.16.0078.00 - GENOVIR. Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Luiz Gonzaga Paula Almeida - Integrante / Marisa Fabiana Nicolás - Integrante / Luciane Prioli Ciapina - Integrante / Alexandra L. Gerber - Integrante / Ana Paula Guimarães - Integrante / ORTIZ, MAURO FREITAS - Integrante / GUEDES, RAFAEL - Integrante / Kary Ann Del Carmem Ocaña Gautherot - Integrante / Joseane Biso de Carvalho - Integrante / DE MORAIS, GUILHERME L. - Integrante. Financiador(es): Financiadora de Estudos e Projetos - Auxílio financeiro.

#### 6. Genômica Aplicada a Recursos Pesqueiros e de Aquicultura do Estado do Rio de Janeiro GARPA-RIO 2014 - Atual

Descrição: O Brasil possui uma extensa costa cuja pesca artesanal serve de sustento para as populações costeiras, e cuja exploração comercial é atividade altamente lucrativa. No entanto, a exploração desregulada dos recursos pesqueiros pode levar ao seu esgotamento em poucos anos. O projeto GARPA-RIO é constituído por uma rede de laboratórios e instituições de pesquisa dos Estados do RJ, SC e RN que visa abordar duas questões de importância fundamental para a preservação desses recursos, através de abordagens de genômica molecular e análises de bioinformática. A primeira questão busca estratégias de melhoramento para cultivo de ostras na costa fluminense. Para isso, utilizaremos os métodos mais recentes de sequenciamento no NextSeq 500 Illumina, através de experimentos de genômica, transcritômica e metagenômica, onde buscaremos caracterizar o perfil genético das ostras nativas do gênero *Crassostrea* sob determinadas condições ambientais e seus possíveis patógenos, bem como detectar os limites dos estoques genéticos na costa. Os experimentos serão realizados comparando as populações de SC, onde o cultivo de *C. gasar* está bem estabelecido, com aquelas do RJ, a fim de detectarmos as diferenças no perfil de expressão e estabelecermos as condições adequadas para o futuro estabelecimento de um cultivo ostreícola no RJ. A aplicação deste cultivo será conduzida pela FIPERJ, parceira neste projeto. A segunda questão visa o monitoramento da qualidade e comercialização do pescado através da identificação molecular e criação de um banco de dados com sequências de marcadores moleculares das espécies, nativas ou não, pescadas ou comercializadas no RJ. Ambas as estratégias implicarão na geração de empregos e desenvolvimento social local, ao mesmo tempo em que proporciona benefícios tangíveis ao ambiente marinho e ganho econômico ao

Estado. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Marisa Fabiana Nicolás - Integrante / Fabíola Marques de Carvalho - Integrante / Luciane Prioli Ciapina - Integrante / Carla Osthoff - Integrante / GUEDES, RAFAEL LUCAS MUNIZ - Integrante / DE MORAIS, GUILHERME LOSS - Integrante / Roberto Pinto Souto - Integrante / Nathalia Pereira Cavaleiro - Integrante.

Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro.

7. Abordagem multi-ômica e modelagem de redes biológicas para priorizar alvos em patógenos clínicos (Bolsa Produtividade Pesquisa CNPq Processo: 306894/2019-0)

Descrição: Priorização de alvos candidatos para futuras aplicações terapêuticas contra patógenos humanos das espécies *Klebsiella pneumoniae*, *Staphylococcus aureus* e *Acinetobacter baumannii*. Especificamente, estudaremos clones emergentes no Brasil e América Latina dessas espécies que além de multirresistentes podem apresentar fenótipo de hipervirulência, os quais representam um sério problema em saúde pública atualmente. Em particular, utilizaremos várias camadas de dados 'ômicos', de redes em escala genômica e dados estruturais/funcionais relacionados a essas espécies para priorizar genes e proteínas com características de potenciais alvos atraentes para o desenvolvimento de novos antimicrobianos (fármacos/biofármacos). Financiador(es): CNPq - Auxílio financeiro

8. Reconstrução de modelos metabólicos integrados com redes regulatórias em genomas bacterianos: 2017 – Atual

Descrição: Este projeto de pesquisa visa selecionar alvos moleculares como resultado da abordagem *in silico* da reconstrução das redes metabólicas em escala genômica (GENRE), combinadas com a análise de balanço de fluxo (FBA) e as redes regulatórias transcricionais (TRNs). Integrantes: Marisa Fabiana Nicolás - Coordenador / Maiana de Oliveira C E Costa - Integrante / Guadalupe del Rosario Quispe Saji - Integrante / Pablo Ivan Pereira Ramos - Integrante / Rodrigo Amarante Colpo - Integrante / Juliana Juliana Simas Coutinho Barbosa - Integrante / Dario Fernandes do Porto - Integrante / Adrián Turjanski - Integrante / Marcelo Marti - Integrante. Financiador(es): Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Bolsa / FAPERJ - Auxílio financeiro.

9. Apoio Computacional à Análise Genômica de Doenças Tropicais Negligenciadas por meio de Mineração de Dados e Aprendizado de Máquina: 2017 - Atual

Descrição: Atualmente, existe uma urgência por resultados científicos decorrentes de demandas emergenciais da sociedade, e.g., na descoberta de novos fármacos para o tratamento de doenças tropicais negligenciadas (DTN) ou ZIKA, o que acionou vários projetos pelos Ministérios de Saúde e de Ciência Tecnologia, Inovações e Comunicações (MCTIC). No Brasil, vários grupos de pesquisa já estão envidando esforços para se adequarem aos novos paradigmas da computação paralela/distribuída, a fim de aprimorarem seus experimentos científicos. Experimentos de bioinformática são complexos e estima-se que o volume de dados produzidos atinja os 44 zettabytes em 2020. Muitos desses experimentos adotam workflows como abstração para representar as etapas computacionais de uma simulação. Muitas etapas dos workflows são datacêtricas e computacionalmente intensivas, assim necessitando de ambientes de processamento de alto desempenho (PAD) como clusters, grades ou nuvens para o processamento de dados em tempo hábil. A maioria das aplicações da bioinformática não está adequada à utilização eficaz de recursos de PAD, pelo que é necessário um esforço

grande para adapta-las, o que não é uma tarefa simples de ser realizada. A análise dos dados também é um ponto fundamental, porém dados científicos são normalmente multi-relacionados, o que demanda técnicas de mineração de dados e aprendizado de máquina. As soluções existentes para gerência dos dados científicos já englobam a execução paralela e a coleta de dados de proveniência em ambientes de PAD, porém, é preciso adequá-las eficientemente a experimentos de bioinformática. Desta forma, o objetivo deste projeto é propor uma série de soluções para a gerência de simulações computacionais de bioinformática em ambientes de PAD. Espera-se conseguir uma maior escalabilidade usando técnicas de paralelização/distribuição tradicionais, granularidade e PAD considerando o uso de proveniência como base para as soluções propostas. Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Coordenador. Auxílio financeiro: Jovem Cientista do Nosso Estado 2017, FAPERJ nº 03/2017.

10. A Global Alliance For Zika Virus Control And Prevention – ZIKAlliance 2016 - Atual  
Descrição: The overall objectives of ZIKAlliance are to assess the impact of Zika virus infection on pregnant women and fetuses as well as to decipher the natural history of Zika virus infection in humans and their environment in the context of other circulating arboviruses. The multidisciplinary ZIKAlliance project will link large observational multicentre cohort studies with basic scientific research to address the above questions, (i) with longstanding shared work experience on arboviral diseases in basic, clinical and applied sciences; (ii) with an established network of clinical cohorts currently studying Dengue Fever in Latin America & the Caribbean; (iii) guided by the principles of One Health approach to respond to the challenges of vector-borne epidemics.. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador. Financiador Horizon 2020

11. Gerenciamento e Análise de Dados Biológicos em Plataformas de Computação de Alto Desempenho (HPC) e de Processamento de Grandes Massas de Dados (Big Data), 2016 – Atual.

Descrição: O desafio em questão é a melhor maneira de processar, gerenciar e analisar o biological big data em ambientes HPC paralelos e distribuídos e torná-la em uma metodologia exitosa. Os cientistas precisam de um grau de abstração, a fim de integrar eficientemente experimentos de bioinformática a várias tecnologias computacionais como sistemas de gerenciamento de workflows científicos (SGWfC), sistemas de gerenciamento de banco de dados (SGBD), aplicações aceleradas por GPU (do inglês, graphics processing unit), aprendizagem de máquina e profundo (do inglês machine and deep learning), sistemas Web, e sistemas de segurança em uma arquitetura HPC como clusters de supercomputadores. No entanto, a integração, o uso e o acoplamento destas tecnologias para ambientes HPC têm muitos outros desafios relacionados principalmente à gerência de recursos em larga escala de dados, tarefas, simulações computacionais, número de processadores e segurança de dados. Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Coordenador / Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Luiz Gadelha - Integrante / Antônio Tadeu Azevedo Gomes - Integrante / Carla Osthoff - Integrante / André da Motta Salles Barreto - Integrante / Fábio Borges de Oliveira - Integrante / Fábio Lima Custódio - Integrante / Roberto Pinto Souto - Integrante / Laurent Dardenne - Integrante / Renato Portugal - Integrante. Financiador(es): FAPERJ - *Auxílio financeiro. Aprovado – Sem entrada de recursos.*

12. BioMiningHPC: Arquitetura baseada em Workflows, Mineração e Proveniência de Dados de Experimentos de Bioinformática para Ambientes HPC no Apoio ao Estudo de Doenças

Negligenciadas e Doenças Genômicas Raras em Humanos, 2016 - Atual

Descrição: Embora o Brasil tenha avançado significativamente nos últimos anos em vários campos das Ciências e tecnologias afins, pesquisas em áreas multidisciplinares como a bioinformática ainda são nascentes, mesmo sendo fundamentais para o desenvolvimento biotecnológico do país. As pesquisas biomédicas/biotecnológicas têm alavancado descobertas científicas devido à exploração da grande quantidade de dados coletada de pesquisas genômicas/proteômicas para a descoberta de padrões de sequências, funções de genes e interações proteína-proteína que alavanquem investigações de biomarcadores e/ou na terapia de doenças. Por outro lado, recentes progressos nas pesquisas na mineração de dados têm levado ao desenvolvimento de numerosos métodos eficientes/escaláveis para mineração, interessantes para os padrões/conhecimento em grandes bancos de dados e.g. métodos de classificação eficiente, análises de valores/resultados atípicos, frequência, métodos de análise de padrões estruturados, ferramentas de análise de dados temporal/espacial, e visualização. O desafio em questão é a melhor maneira de tornar experimentos de mineração de dados biológicos em larga escala em uma metodologia exitosa. Neste caso, o cientista precisa de um grau de abstração para poder atrelar as atividades domínio específicas da bioinformática a aquelas que melhor se adéquam ao algoritmo de mineração e acoplá-los em uma arquitetura. Esses experimentos podem ser modelados como workflows e interconectados a Sistemas de Gerenciamento de Workflows Científicos, Sistemas de Gerenciamento de Banco de Dados e Sistemas Web. Desta maneira, workflows podem usufruir das vantagens de paralelismo e distribuição de ambientes de computação de alto desempenho como clusters de supercomputadores e recentemente nuvens. No entanto, a integração/uso desses ambientes apresentam outros muitos desafios relacionados principalmente à gerência de recursos em larga escala i.e. dados, tarefas, simulações computacionais, número de processadores. Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Coordenador / Daniel Cardoso Moraes de Oliveira - Integrante / Aline Paes

- Integrante / Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Luiz Gadelha - Integrante / Antônio Tadeu Azevedo Gomes - Integrante / Marta Lima de Queiros Mattoso - Integrante / Vanessa Braganholo - Integrante. Financiador(es): FAPERJ - *Auxílio financeiro. Aprovado – Sem entrada de recursos.*

13. Medicina de precisão aplicada à imunodeficiência primária (PIDD): Uma abordagem progressiva e custo-efetiva utilizando o sequenciamento de nova geração. 2016 - Atual

Descrição: As imunodeficiências primárias são doenças genéticas raras que têm como principal característica alterações das funções do sistema imune, levando à maior suscetibilidade às infecções de repetição, autoimunidade e neoplasias. A criança com imunodeficiência primária, embora relativamente rara, é um paciente de alto custo para o SUS, devido a dificuldades diagnósticas, requer o uso de antibióticoterapia e internações prolongadas que em muitos casos evoluem a óbito. Alternativas terapêuticas para alguns casos são de alto custo como transplantes de Células Tronco Hematopoiéticas ou infusão de imunoglobulina intravenosa. No entanto, a indicação terapêutica adequada está diretamente relacionada ao diagnóstico diferencial, precoce e preciso, possibilitando alcançar a eficiência da intervenção clínica, com redução significativa do número de infecções e internações. Até o momento existem mais de 300 mutações causadoras de PIDD. Os testes de diagnóstico molecular existentes podem ser inconclusivos devido a sobreposição com fenótipos clínicos. Dentre os testes genéticos para variantes genéticas associados à PIDD, o sequenciamento de genes individuais usando a metodologia de Sanger é demorado e caro. Embora existam painéis de genes PIDD

conhecidos, este método possui limitações, tais como a incapacidade de detectar novos genes relacionados à PIDD. Nesse trabalho propomos o estudo de diferentes grupos de imunodeficiências através de estratégias de sequenciamento de exomas, com o objetivo de alcançar o diagnóstico no maior nível de complexidade e definir de forma precisa a deficiência no sistema imune. O conhecimento dessas alterações moleculares permitirá o tratamento mais efetivo do paciente e possibilitarão benefícios a curto e longo prazo, com adoção de protocolos de cuidados adequados e minimizando internações graves e morte associada a essas patologias. Adicionalmente, o conhecimento dos genes envolvidos nessas patologias no contexto de doenças do nosso meio, permitirão dissecar as vias moleculares essenciais para o combate às doenças negligenciadas. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Marisa Fabiana Nicolás - Integrante / Fabíola Marques de Carvalho - Integrante / GUEDES, RAFAEL LUCAS MUNIZ - Integrante / Joseane Biso de Carvalho - Integrante / DE MORAIS, GUILHERME L. - Integrante / CIAPINA, LUCIANE P. - Integrante / Leonardo Gomes - Integrante / Leticia Guida - Integrante / Zilton Vasconcelos - Integrante. *Aprovado – Sem entrada de recursos.*

14. Apoio à manutenção da infraestrutura do centro multiusuário Unidade de Genômica Computacional Darcy Fontoura de Almeida (UGCDFA) 2016 - Atual

Descrição: A Unidade de Genômica Computacional Darcy Fontoura de Almeida (UGCDFA), inaugurada no final de 2008, é uma Unidade Multiusuário destinada a atender aos projetos genomas do Estado do Rio de Janeiro bem como do país e do exterior e está associada ao Laboratório Nacional de Bioinformática (LABINFO) do LNCC. A UGCDFA atua em sincronia com o LABINFO sendo este um centro de excelência em Bioinformática no Brasil e no exterior. Esta associação tem como finalidade integrar as atividades de sequenciamento em larga-escala de DNA e de bioinformática, utilizando a infraestrutura de Computação de Alto Desempenho do LNCC, permitindo maior agilidade no processamento e análise dos dados gerados pelos sequenciadores de DNA de nova geração instalados na UGCDFA. Recentemente, com a instalação do supercomputador Santos Dumont, com um total de 18.144 núcleos de CPU, as sequências geradas na UGCDFA poderão ser processadas com maior velocidade atendendo de forma mais eficiente as várias redes genômicas, grupos parceiros e colaboradores. Até o momento, foram sequenciados cerca de 450 genomas, metagenomas, transcritomas totalizando, aproximadamente, 60Tb de dados gerados pela UGCDFA e processados pelo LABINFO. É importante destacar que para todos os projetos desenvolvidos em colaboração, fazemos parte do alicerce central, visto que somos responsáveis pela geração e processamento das informações genômicas. Esta proposta tem por objetivo a manutenção da infraestrutura da UGCDFA visando continuar gerando grandes quantidades de dados para diversos modelos biológicos e disponibilizando serviços para instituições de pesquisa e acadêmicas, nacionais e internacionais. Ressaltamos que devido ao número de sequenciamentos realizados, processados e analisados na UGCDFA/LABINFO, atualmente, o Estado do Rio de Janeiro tem um papel de destaque nacional na área de genômica computacional/bioinformática, pois foi o que mais gerou, depositou e analisou dados de genomas, transcritomas e metagenomas..

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador / Fabíola Marques de Carvalho - Integrante / Luciane Prioli Ciapina - Integrante / Nicolás, Marisa F. - Integrante / DE MORAIS, GUILHERME LOSS - Integrante / GUEDES, RAFAEL - Integrante / Kary Ann Del Carmem Ocaña Gautherot - Integrante / Joseane Biso de Carvalho - Integrante. Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de

Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Auxílio financeiro. *Aprovado - Sem entrada de recursos.*

15. Abordagem integrativa e multi-ômica na priorização de alvos contra patógenos de importância clínica combinando técnicas de bioinformática e biotecnologia: 2019 – Atual

Descrição: As contribuições científicas, tecnológicas e de inovação a partir deste projeto vão desde a aplicação da bioinformática, modelagem molecular, machine learning, virtual screening, molecular docking, para a identificação e seleção de alvos candidatos, até a biologia e biotecnologia para a avaliação experimental de alvos específicos identificados. Ressalta-se a consolidação da interação entre grupos de pesquisa brasileiros, argentinos e mexicanos com expertises complementares e forte atuação em suas respectivas áreas que vem trabalhando em conjunto há mais de cinco anos, a exemplo do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC), Fundação Oswaldo Cruz (Fiocruz - Instituto Gonçalo Moniz, BA), UNIFESP, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) e Universidad de Buenos Aires (UBA). Integrantes: Marisa Fabiana Nicolás - Coordenador / Luciane Prioli Ciapina - Integrante / Ana Tereza Ribeiro Vasconcelos - Integrante / Ana Cristina Gales - Integrante / Pablo Ivan Pereira Ramos - Integrante / Adrian Gustavo Turjanski - Integrante / Laurent E. Dardenne - Integrante / Dario Fernandes do Porto - Integrante / Ernesto Perez Rueda - Integrante. Financiador(es): Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior

- *Auxílio financeiro. Aprovado -Sem entrada de recursos.*

16. Abordagem multi-ômica e modelagem de redes biológicas para priorizar alvos em *Staphylococcus aureus*: 2019 - Atual

Descrição: a presente proposta de projeto tem ênfase na priorização de alvos candidatos para futuras aplicações terapêuticas contra o patógeno humano *Staphylococcus aureus* pertencente à linhagem ST239-SCCmecIII do Clone Epidêmico Brasileiro (BEC) resistente a metilina. Especificamente, utilizaremos várias camadas de dados 'ômicos', de redes em escala genômica e dados estruturais/funcionais relacionados a essas espécies para priorizar genes e proteínas com características de potenciais alvos atraentes para o desenvolvimento de novos antimicrobianos (fármacos/biofármacos). Integrantes: Marisa Fabiana Nicolás - Coordenador / Maiana de Oliveira C E Costa - Integrante / Agnes Marie S Figueiredo - Integrante / Dario Fernandes do Porto - Integrante. Financiador(es): FAPERJ - *Auxílio financeiro. Aprovado -Sem entrada de recursos.*

### **Sob coordenação de outras instituições**

1. Corona-ômica BR MCTIC/FINEP: Rede Nacional de genomas, exoma e transcriptoma de COVID-19 para identificação de fatores associados à dispersão da epidemia e severidade

Descrição: O presente estudo tem por objetivo realizar uma ampla análise da variabilidade genética humana e viral associadas com a dispersão da epidemia no país, bem como aos perfis de suscetibilidade a doença.;A partir da análise de genoma completo dos vírus, esperamos identificar mutações associadas a virulência ou ainda potenciais alvos terapêuticos.Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Fernando Spilki - Coordenador. Financiador(es): Financiadora de Estudos e Projetos - Auxílio financeiro.

2. Estudo-Piloto para a Implantação de uma Rede Brasileira de Vigilância de Resistência Antimicrobiana em Saúde Única 2019 - Atual

Descrição: A epidemiologia da resistência bacteriana aos antimicrobianos é complexa e tem sido amplamente reconhecida a importância de um sistema de vigilância integrado baseado no conceito “One-Health”- Saúde Única. Vários estudos brasileiros têm reportado a frequência, os fenótipos e genótipos de bactérias resistentes em isolados de origem humana, de distintos animais, incluindo animais selvagens, de produção e de estimação, bem como de alimentos e do meio ambiente. Entretanto, até onde é do nosso conhecimento, nenhum estudo coletou, prospectivamente e simultaneamente, isolados de humanos, de animais e do ambiente sob a perspectiva de uma vigilância integrada em saúde única. Com o objetivo de estimar a frequência de *E. coli* e *K. pneumoniae* resistentes às cefalosporinas de amplo espectro e carbapenêmicos, estabelecemos uma rede colaborativa com grupos de pesquisa das cinco regiões geográficas brasileiras para obtenção de amostras de humanos saudáveis e doentes, animais de produção, alimento e do meio ambiente sob o mesmo critério de inclusão e metodologia de avaliação. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Ana Cristina Gales - Coordenador / CAYÔ, RODRIGO - Integrante / Antônio Carlos Campos Pignatari - Integrante / Carlos Roberto Veiga Kiffer - Integrante / Timothy R. Walsh - Integrante / Diego Andrey - Integrante.

### 3. Rede Fluminense para a Pesquisa e Desenvolvimento de Nanomateriais Nanobiosistemas. 2019 – Atual

Descrição: Esta proposta visa a criação de uma rede de pesquisa em nanotecnologia fortemente interligada entre seis instituições (UFRJ, UFF, Inmetro, PUC-RJ, Fiocruz e LNCC) reconhecidas pela alta qualidade na formação de seus pesquisadores e estudantes e de sua produção científica, assim como pela vocação para interação com o meio industrial. Diversas equipes interinstitucionais formadas nesta proposta aliarão suas expertises para o desenvolvimento, avaliação de inocuidade, e caracterização de nanomateriais e nanobiosistemas com grande potencial para a fabricação de nanodispositivos e nanoprodutos na área da saúde, para tecnologias de armazenamento e processamento de informação, para geração de energia limpas e preservação do meio ambiente. A sinergia entre pesquisadores atuantes em Ciência de Materiais, Ciências Biológicas e Farmacêuticas, Física, Química, Medicina, Modelagem Computacional e Bioinformática, de vários níveis de experiência (de pesquisadores consolidados à jovens cientistas promissores) permitirá sem dúvida a geração de pesquisas de fronteira e de alto nível científico-tecnológico. É importante enfatizar que, além da geração de conhecimento, nossa proposta possui forte vocação para a inovação, uma vez que, praticamente, todos os laboratórios envolvidos possuem programas oficiais de apoio a geração de empresas e produtos. A formação desta Rede de Nanotecnologia também contribuiu para consolidação da nova pós-graduação em Nanobiosistemas que envolve quatro das instituições (UFRJ, INMETRO, LNCC e FIOCRUZ) e que visa a formação de pesquisadores qualificados e aptos a proporem soluções sustentáveis, usando a nanociência e nanotecnologia, para os desafios atuais e futuros na área da saúde e do meio ambiente, as quais são fundamentais para o país. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Carlos Alberto Achete - Coordenador. Financiador(es): Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do RJ - Cooperação.

### 4. Diagnóstico e prognóstico de mulheres com Neoplasia Intraepitelial Grau 2: identificação e validação clínica de biomarcadores. 2017 - Atual

Descrição: Avaliar a introdução de novas tecnologias (biomarcadores, imuno-histoquímica, expressão gênica, genotipagem HPV, quantificação digital) no diagnóstico e prognóstico de

pacientes com NICII. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Fabio Bastos Russomano - Integrante / Cecília Vianna de Andrade - Coordenador

5. Laminin and Cell Therapy for Muscular Dystrophies 2015 - Atual

Descrição: We propose to decipher the organisation of the laminin matrix, its relationship with myogenic precursors proliferation and differentiation, and its role in normal and dystrophic muscle, including on gene expression in vivo in xenografts. We will investigate the presence of laminin isoforms and receptors in normal and dystrophic cultured human muscle cells, as well as in muscle biopsies. We will define the dynamic evolution of laminin isoforms and their possible deregulation in dystrophic conditions by transcriptomic analyses. We will then alter the expression of laminin isoforms and laminin receptors in vitro using siRNAs, in order to improve engraftment of muscle cells for cell therapy and identify new targets for other therapeutic approaches. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Wilson Savino - Coordenador / Vincent Mouly - Integrante.

6. Sistema de Microscopia de Óptica Não-Linear Multifotônica: Introdução de um Novo Recurso na Plataforma de Bioimagem da Fundação Oswaldo Cruz. 2015 - Atual

Descrição: A microscopia de luz tem evoluído muito, tanto pelo constante desenvolvimento tecnológico dos constituintes dos microscópios, quanto pela retroalimentação oriunda das questões científicas por eles estudadas. Nesse cenário, destaca-se a microscopia de óptica não-linear multifotônica, cuja disseminação entre os pesquisadores é crescente. O aperfeiçoamento tecnológico de seus componentes, incluindo lasers sintonizáveis de centralização automática, lentes objetivas especiais e detectores de alta sensibilidade, vem aumentando o escopo de aplicações dessa técnica, as quais passaram a incluir, por exemplo, estudo de processos bioquímicos dinâmicos em células vivas e mesmo em pequenos animais de experimentação. Por conta disso, a presente proposta solicita a aquisição de um sistema de microscopia multifotônica, a ser integrado à Plataforma de Bioimagem da Fundação Oswaldo Cruz, e disponibilizado para a comunidade científica do nosso estado enquanto uma importante ferramenta para estudos de biologia celular e estrutural. Esta Plataforma está inserida na Rede de Plataformas Tecnológicas da Fiocruz e dispõe de equipamentos de microscopia fotônica e eletrônica, distribuídos entre suas diferentes subunidades e colocados à disposição da comunidade interna e externa. Considerando as expertises temáticas dos diferentes pesquisadores que aderiram a este projeto, a aquisição do microscópio multifotônico permitirá um salto de qualidade nas análises realizadas em experimentos de migração e diferenciação celular, interações celulares e moleculares, reconstruções tridimensionais em alta resolução, de tecidos e de órgãos. Tais estudos certamente revelarão aspectos ainda não desvendados sobre a fisiologia celular e tecidual, além de permitir análises complexas relativas às modificações encontradas em diversas doenças agudas e crônicas. Além disso, permitirá que os alunos de graduação e pós-graduação possam realizar análises cujo detalhamento não poderia ser realizado sem este equipamento.

Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Wilson Savino - Coordenador.

7. Associate Teams: SciDISC - Scientific data analysis using Data-Intensive Scalable Computing 2017 - Atual

Descrição: This project is an international collaborative project between Brazil and France, funded by the French side. --Inria (France) supports "Associate Teams" to strengthen scientific collaboration between Inria project teams and top-level research teams worldwide. -- Data-

intensive science requires the integration of two fairly different paradigms: high-performance computing (HPC) and data-intensive scalable computing (DISC). Spurred by the growing need to analyze big scientific data, the convergence between HPC and DISC has been a recent topic of interest. This project will address the grand challenge of scientific data analysis using DISC (SciDISC), by developing architectures and methods to combine simulation and data analysis. The expected results of the project are: new data analysis methods for SciDISC systems; the integration of these methods as software libraries in popular DISC systems, such as Apache Spark; and extensive validation on real scientific applications, by working with our scientific partners such as INRA and IRD in France and Petrobras and the National Research Institute (INCT) on e-medicine (MACC) in Brazil.<https://www.inria.fr/en/associate-team/scidisc>.

Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Integrante / Daniel Cardoso Moraes de Oliveira - Integrante / Alvaro Coutinho - Integrante / Fabio Andre Machado Porto - Integrante / Marta Lima de Queiros Mattoso - Integrante / Patrick Valduries - Coordenador / Esther Pacitti - Integrante / Reza Akbarinia - Integrante / OGASAWARA, EDUARDO - Integrante / Jose Camata - Integrante / Florent Maseglia - Integrante / Dennis Shasha - Integrante.

#### 8. Metodologias, Ferramentas e Abstrações para Produtividade em Computação Científica de Alto Desempenho: 2016 – Atual

Descrição: O desafio em questão é a melhor maneira de processar, gerenciar e analisar dados científicos em ambientes HPC paralelos e distribuídos e torná-la em uma metodologia exitosa. Os cientistas precisam de um grau de abstração, a fim de integrar de forma produtiva experimentos científicos computacionais a várias tecnologias computacionais como sistemas de gerenciamento de workflows científicos (SGWfC), bancos de dados científicos, aplicações otimizadas por aceleradores tais como GPUs (do inglês, graphics processing unit), aprendizagem de máquina e profunda (do inglês machine and deep learning), portais científicos na Web, e sistemas de segurança em arquiteturas HPC. Um dos desafios atuais é permitir que as tanto os experimentos científicos computacionais quanto as aplicações que os compõem sejam implementados com ferramentas mais produtivas, permitindo que tirem proveito em um prazo mais curto de recursos computacionais de alto desempenho como supercomputadores e plataformas para processamento de Big Data..

Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Integrante / Fabio Andre Machado Porto - Integrante / Luiz Gadelha - Coordenador / Antônio Tadeu Azevedo Gomes - Integrante / Carla Osthoff - Integrante / Fábio Borges de Oliveira - Integrante / Fábio Lima Custódio - Integrante / Roberto Pinto Souto - Integrante / Frédéric Gerard Christian Valentin - Integrante / Gilson Antônio Giraldi - Integrante.

Financiador(es): FAPERJ - Auxílio financeiro. Aprovado – Sem entrada de recursos.

#### 9. Estudo das bases moleculares das comorbidades associadas ao desenvolvimento de COVID-19 grave - Uma abordagem de biologia de sistemas

Descrição: Para apoio no tratamento de pacientes graves com COVID-19, é preciso entender a intrincada correlação molecular da infecção pelo SARS-CoV-2 com as comorbidades associadas à gravidade e seus tratamentos. Pretendemos avançar na compreensão destes mecanismos por meio da modelagem computacional, utilizando algoritmos de aprendizado de máquina e análise de redes biológicas, analisando dados transcriptômicos e de proteoma de células humanas infectadas com SARS-CoV-2 para identificar os genes e proteínas associados à infecção. Esta análise fornecerá uma ampla visão geral das moléculas envolvidas em doenças relacionadas à COVID-19 grave e como elas podem estar relacionadas à infecção por

SARS-CoV-2. A integração e análise deste complexo conjunto de informações irá gerar uma lista de fármacos (individuais ou combinados), candidatos ao reposicionamento, adequados aos diversos casos clínicos.

Situação: Em andamento; Natureza: Pesquisa.

Integrantes: Fabricio Alves Barbosa da Silva - Coordenador / Alberto Martín Rivera Dávila - Integrante / Marcelo Trindade dos Santos - Integrante / CASTRO, MARIA CLICIA S. - Integrante / Alessandra Jordano Conforte - Integrante / Adriano Barbosa - Integrante / Andrea Henriques Pons - Integrante / Anna Cristina Calçada Carvalho - Integrante / Marcelo Alves Pinto - Integrante / Alba Cristina Magalhaes Alves de Melo - Integrante / Maria Emilia Machado Telles Walter - Integrante / Maiana de Oliveira Cerqueira e Costa - Integrante / Marisa Fabiana Nicolás - Integrante / Helder Takashi Imoto Nakaya - Integrante.

Financiador(es): INOVA-FIOCRUZ - Auxílio financeiro.

### **2.1. Acordos de cooperação, coordenados pelo LABINFO, sem aporte financeiro**

1. LIA - Laboratório Internacional Associado - Título do projeto: Laboratório Internacional de pesquisa em bioinformática – LIRIO: 2012 - Atual

Descrição: The current project for a LIA builds upon a strong collaboration between the team of a French-Brazilian researcher with a background in discrete mathematics and algorithmics for the life sciences who has made her scientific career in France, since 2001 in the Laboratoire de Biométrie et Biologie Évolutive UMR 5558, and the team of a Brazilian researcher with a background in genetics and bioinformatics, and extensive national and international links in the area of bioinformatics. The research that will be conducted in the LIA will concern putting together all the activities currently conducted by each team separately or that each team has already planned to do, but also new research that the synergy between the two teams will enable to address in future. This synergy represented by the LIA should also allow us to apply for other sources of funding to support the research we wish to develop. Initially, this research will be concentrated on two main axes, one strongly concerned with the host-parasite relationship and the second with micro-environmental genomics and systems biology. Both address complex systems by a broad variety of experimental, bioinformatic and algorithmic approaches that reflect the complementarity of the two teams involved (biology including experimental part for the Brazilian team, algorithmics for the French one) while bioinformatics is a common language between the two. Besides fundamental issues, the two axes may have also important health-related implications. Training will represent another key aspect of the LIA, and will aim at extending the already intensive exchanges of researchers, Master and PhD students between the two French and Brazil.

Natureza: Pesquisa. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos – Coordenador.

2. Global Approach to Biological Research, Infectious diseases and Epidemics in Low income countries - GABRIEL network: 2014 - Atual

Descrição: Co-operation between Foundation Mérieux and LNCC for research and training in the field of laboratory-based surveillance of infectious diseases.

Situação: Em andamento; Natureza: Outra. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Coordenador.

3. “Acordo de Cooperação Técnico-Científica com a Fundação Oswaldo Cruz”: 2016 - Atual  
Descrição: O presente Acordo de Cooperação Técnico-Científica entre a FIOCRUZ e o LNCC tem por objetivo: i) fortalecer o intercâmbio de conhecimento técnico-científico de pessoal nas áreas de atuação das instituições; ii) desenvolver atividades de pesquisa em temas de interesse comum; iii) Disponibilizar, compartilhar os recursos tecnológicos e computacionais; iv) promover a formação de pessoal em nível de pós-graduação e v) realizar o sequenciamento genômico, as análises de Bioinformática e a construção de bancos de dados para estudos relativos à fisiologia do sistema imune, fisiopatologia de doenças genéticas, doenças neurodegenerativas e do neurodesenvolvimento, doenças infecciosas e patógenos.

4. Global Biodiversity and Health Big Data Sharing Initiative: 2019 - Atual  
Descrição: The objectives of this project are to build a Global Biodiversity and Health Big Data Alliance, whose core members consist of countries and regions along the Belt and Road based on Beijing Institute of Genomics solid foundation and international status in the field of biological big data, and collaborations with international research organizations and universities; to explore new mechanism of data openness and sharing; to develop a platform for omics big data integration, translation and sharing; to construct a world-class omics data center containing a variety of repositories and knowledge bases that are publicly accessible to worldwide communities; and to promote the development of science and innovation for global human health and biodiversity studies. Integrantes: Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos

- Coordenador / Yiming Bao - Integrante.

### **Encerrados em 2020**

1. Genômica Aplicada a aquicultura da ostra nativa de importância econômica (*Crassostrea gasar*) no Estado do Rio de Janeiro

Descrição: O presente projeto tem como foco a caracterização dos perfis genômicos da espécie nativa da ostra brasileira (*C. gasar*) incluindo análises comparativas com a ostra japonesa mais cultivada no mundo (*C.gigas*) e aproveitar-se dessa ampla área de conhecimento ainda pouco explorada para a formação de recursos humanos para ensino e pesquisa. Esses conhecimentos são necessários para estabelecer as condições necessárias para aplicação de políticas que evitem a degradação dos estoques pesqueiros no Estado do Rio de Janeiro. A rede GARPA-RIO busca estabelecer as condições necessárias para aplicação de políticas que evitem a degradação dos estoques ostreícolas no Estado do Rio de Janeiro, através da caracterização do perfil genômico da espécie mais consumida de ostras nativas, *C. gasar*. Para identificar as melhores condições de crescimento da *C. gasar* no Estado do Rio de Janeiro, com o objetivo de uma posterior implantação de cultivo no litoral fluminense, serão realizadas diversas análises de seu perfil genético sob determinadas condições limitantes em comparação com a população da mesma espécie em Santa Catarina. Busca-se compreender se as condições já estabelecidas para cultivo de *C. gasar* em Santa Catarina podem ser aplicadas à população do Rio de Janeiro e, no caso provável de diferenças adaptativas importantes, empregar uma abordagem genômica para guiar o processo de melhoramento genético das mesmas.

Financiador(es): CNPq

## 2. Rede Avançada em Biologia Computacional (RABICÓ)

Descrição: A Rede Avançada em Biologia Computacional (RABICÓ) terá sua sede no LNCC e pretende oferecer um conjunto de softwares com tecnologia moderna e atualizada para o desenvolvimento de aplicações que requerem alto poder computacional e recursos avançados de visualização científica, possibilitar a geração e estimular o desenvolvimento da pesquisa de forma integrada com equipes multidisciplinares, para o estudo de problemas relacionados à saúde humana, animal, vegetal e ambiental, e principalmente, formar recursos humanos qualificados na Graduação e na Pós-Graduação.

## 3. Mineração de Dados de Experimentos de Bioinformática Executados em Larga Escala no Apoio ao Estudo de Doenças Negligenciadas e Doenças Genômicas em Humanos Descrição:

As pesquisas biomédicas/biotecnológicas têm alavancado descobertas científicas devido à exploração da grande quantidade de dados coletada de pesquisas genômicas/proteômicas para a descoberta de padrões de sequências, funções de genes e interações proteína-proteína que alavanquem investigações de biomarcadores e/ou na terapia de doenças. Por outro lado, recentes progressos nas pesquisas de mineração de dados têm levado ao desenvolvimento de numerosos métodos eficientes/escaláveis para mineração, interessantes para os padrões/conhecimento em grandes bancos de dados e.g. métodos de classificação eficiente, análises de valores/resultados atípicos, frequência, métodos de análise de padrões estruturados, ferramentas de análise de dados temporal/espacial, e visualização. O desafio em questão é a melhor maneira de tornar experimentos de mineração de dados biológicos em larga escala em uma metodologia exitosa. Neste caso, o cientista precisa de um grau de abstração para poder atrelar as atividades domínio específicas da bioinformática a aquelas que melhor se adequam ao algoritmo de mineração e acoplá-los em uma arquitetura. Esses experimentos podem ser modelados como workflows e interconectados a Sistemas de Gerenciamento de Workflows Científicos, Sistemas de Gerenciamento de Banco de Dados e Sistemas Web. Desta maneira, workflows podem usufruir das vantagens de paralelismo e distribuição de ambientes de computação de alto desempenho como clusters de supercomputadores e recentemente nuvens. No entanto, a integração/uso desses ambientes apresentam outros muitos desafios relacionados principalmente à gerência de recursos em larga escala i.e. dados, tarefas, simulações computacionais, número de processadores. Integrantes: Kary Ann del Carmen Ocaña Gautherot - Coordenador / Marco T. A. Garcia-Zapata - Integrante / Aline Paes - Integrante / Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - Integrante / Fabio Andre Machado Porto - Integrante / Luiz Gadelha - Integrante / Marta Lima de Queiros Mattoso - Integrante / Daniel Cardoso Moraes de Oliveira - Integrante. Auxílio financeiro: Universal MCTI/CNPq.

### 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

#### 3.1. COVID-19

Através das tecnologias de sequenciamento de nova geração (NGS – *next-generation sequencing*) é possível realizar uma varredura de fatores genéticos e moleculares através de abordagens ômicas (genômica viral, metagenômica, exomas e transcritomas humanos), objetivando elucidar as particularidades individuais que levam a diferentes respostas diante da infecção pelo SARS-CoV-2. A compreensão desse fenômeno gera conhecimentos que permitirão, com base nas características intrínsecas da população brasileira, a descoberta de

novos alvos moleculares associados com a infecção e as manifestações clínicas da Covid-19 que podem ser utilizados para o desenvolvimento de tecnologias terapêuticas e diagnósticas de precisão e até mesmo personalizadas. Além disso, permite identificar, por meio dos fatores intrínsecos, os indivíduos que possuem risco elevado em desenvolver os sintomas mais graves da Covid-19. As análises do genoma viral possibilitam compreender os fatores externos de co-infecção e a evolução e dispersão geográfica do SARS-CoV-2 no país. O desenvolvimento de uma plataforma computacional permitirá que os dados de ômica, bem como os metadados, sejam integrados e para tanto, técnicas de inteligência artificial e computação de alto desempenho serão empregadas para gerenciamento, otimização e processamento rápido das análises.

Todos esses estudos estão sendo desenvolvidos em Rede, sendo que o LABINFO coordena a Rede Corona-ômica-RJ (FAPERJ) e a Rede Coalizão multiômicas, do Ministério da Saúde, que envolve 5 outras instituições, e integra a Rede Vírus, apoiada pelo MCTIC (CORONA-ÔMICA-BR <http://www.corona-omica.br-mctic.Incc.br/>), que envolve 12 instituições de todas as regiões do país.

Até o momento foram produzidos dois artigos científicos: 1. “Evolution and epidemic spread of SARS-CoV-2 in Brazil”, publicado na Science; 2. “Maternal SARS-CoV-2 infection associated to systemic inflammatory response and pericardial effusion in the newborn: a Case-Report”, publicado na Journal of the Pediatric Infectious Diseases Society (ver item 4.1.); e três outros estão submetidos para publicação.

### 3.2. Biodiversidade de aves

Projetos de sequenciamento de genomas inteiros estão cada vez mais povoando a árvore da vida e caracterizando a biodiversidade. O grande desafio é como comparar eficientemente um grande número de genomas em um contexto evolutivo. Um primeiro passo crítico é a detecção precisa de sequências ortólogas. Neste estudo, foi utilizado um conjunto de dados comparativo do genoma (363 genomas de 92,4% das famílias de aves) em combinação com um pipeline que aproveita um alinhamento de genoma inteiro sem referência para identificar regiões ortólogas em maior número do que era possível anteriormente e reconhecer novidades genômicas em determinadas linhagens de aves. Os resultados demonstram que o aumento da diversidade de genomas utilizados em estudos comparativos pode revelar variações mais compartilhadas e específicas da linhagem, e melhorar a investigação de características genômicas. É esperado que este recurso genômico ofereça novas perspectivas sobre os processos evolutivos em análises comparativas entre espécies e auxilie nos esforços de conservação das espécies. Este estudo foi desenvolvido em colaboração com várias instituições internacionais e gerou o artigo intitulado “Dense sampling of bird diversity increases power of comparative genomics” na revista Nature (ver item 4.1.).

### 3.3. Inteligenciômica

O desenvolvimento de tecnologias que geram grandes quantidades de dados (high-throughput) criou a necessidade do desenvolvimento de estratégias para analisar, integrar e interpretar essa enorme quantidade de dados (big data). Embora uma grande variedade de métodos estatísticos tenha sido projetada para analisar big data, experiências com o uso de técnicas de inteligência artificial (IA) sugerem que estes métodos são os mais apropriados. Em particular, a análise dos dados de sequenciamento de genoma e transcrito, que lidam com dados grandes e complexos, incluindo análise de sequências, têm se beneficiado de vários

algoritmos de aprendizado de máquina (Machine Learning - ML) e aprendizagem profunda (Deep Learning – DL). Para experimentos complexos de metagenomas, transcritomas, exomas que envolvem fatores genéticos humanos, métodos de DL são indicados como a melhor maneira de melhorar tanto o desempenho da classificação quanto a descoberta de características biológicas e padrões, podendo extrair informações complexas não notadas pelas análises iniciais.

Nesse sentido vários softwares estão sendo desenvolvidos e dois destes foram registrados no INPI.

#### 3.4. Análise de Metagenomas

A metagenômica consiste na análise, independente de cultivo, de genomas presentes em dado habitat. As informações obtidas a partir da análise de metagenomas podem ser usadas para determinar a diversidade de uma comunidade, a presença de microrganismos específicos ou dominantes, rotas metabólicas, bem como determinar a simples presença de um gene. Na área de petróleo o objetivo principal é realizar estudos ambientais em áreas influenciadas pela indústria do de óleo e gás através de estudos metagenômicos. De acordo com os interesses da indústria de óleo e gás e disponibilidade qualitativa e quantitativa das amostras serão realizadas análises metagenômicas que permitirão acessar o perfil taxonômico, funcional e metabólico dos ambientes estudados, realizar estudos comparativos entre as comunidades, bem como buscar produtos gênicos de interesse biotecnológico. Esse conhecimento poderá ser útil para o desenvolvimento de medidas de intervenção nos processos, visando redução de custos e aumento da produção. Além disso, será útil para avaliação da degradação do ambiente e proposição de medidas de recomposição dos ecossistemas degradados.

Na área de saúde humana a metagenômica possibilita a descoberta de novos vírus humanos através da caracterização de seus genomas. Caracterização esta que pode até prever aspectos importantes de novos microorganismos, como seu potencial patogênico, antigênico e tropismo. A Amazônia brasileira abriga a maior diversidade de arbovírus do mundo e tem características epidemiológicas para disseminação de novos vírus para a população (i.e., possui grandes centros urbanos, fluxos migratórios entre áreas urbanas e selvagens e para outras regiões do país). Neste sentido, considerando a potencial ameaça destes vírus para a saúde da população e o risco epidemiológico inerente a esta região, é evidente que se justifica o esforço para caracterização de viromas de plasma e sangue de primatas e de doadores que nela habitam.

#### 3.5. Estudos de arboviroses

O Brasil tem sofrido com diversas epidemias de arboviroses ao longo dos últimos séculos. Virose como Zika, Febre Amarela, Chikungunya, Dengue, Oropouche e Mayaro são transmitidos por mosquitos vetores abundantes no Brasil. Cerca de 1-5% da população exposta a esses vírus desenvolvem quadros clínicos mais severos e até o momento não entendemos os fatores envolvidos no agravamento. Uma busca ativa deve ser estimulada no intuito de gerar alvos que possam ser utilizados como preditores de severidade a serem utilizados em projetos de intervenção de saúde pública prevenindo os casos fatais. Através de estratégias de genômica viral, exoma, transcritômica e metagenômica serão analisadas amostras humanas e de primatas por meio de métodos de inteligência artificial (Deep Learning) com o objetivo de extrair conhecimento nos dados gerados. Além disso, a integração com metadados auxiliam na identificação de possíveis fatores envolvidos na susceptibilidade aos casos mais severos de arboviroses. Trata-se de um projeto interdisciplinar envolvendo pesquisadores com conhecimento em diferentes áreas (bioinformática, bioestatística, matemática, médicos,

virologistas, genética, biologia celular e neurocientistas) de diferentes instituições do Rio de Janeiro e nacionais na tentativa de identificar os fatores preditivos que expliquem a susceptibilidade de uma pequena proporção da população acometida por arboviroses em desenvolverem manifestações clínicas severas e fatais.

Destacamos a produção de dois artigos científicos: 1. “Zika virus targets the human thymic epithelium”, publicado na Scientific Reports; 2. Molecular alterations in the extracellular matrix in the brains of newborns with congenital Zika syndrome” publicado na Science Signaling (ver item 4.1.)

### 3.6. Resistência a antibióticos

A resistência antimicrobiana tem sido reconhecida como uma das mais graves ameaças globais à saúde humana no século XXI. O uso de antimicrobianos na medicina humana, na agricultura e na pecuária têm contribuído para a seleção de bactérias multirresistentes. Embora comumente detectadas no ambiente hospitalar, bactérias multirresistentes também têm sido detectadas em outros nichos ecológicos. As consequências da contaminação da água e do solo por bactérias que carregam genes codificadores de carbapenemases ainda são desconhecidas, mas poderiam levar à contaminação dos alimentos, animais de produção e à aquisição de infecções comunitárias causadas por estas bactérias. A epidemiologia da resistência bacteriana aos antimicrobianos é complexa e tem sido amplamente reconhecida a importância de um sistema de vigilância integrado baseado no conceito “One-Health”- Saúde Única.

Ainda neste tópico estamos analisando genomas de cepas de clones emergentes de *Klebsiella pneumoniae* ST16 e ST15 que além de resistentes aos antimicrobianos apresentam fenótipos de elevada virulência. Esses clones são novos isolados clínicos de *K. pneumoniae* produtora de KPC-2 e hipervirulenta mostram altas taxas de mortalidade nos hospitais.

Destacamos a publicação do artigo científico intitulado “Healthcare-associated carbapenem-resistant OXA-72-producing *Acinetobacter baumannii* of the clonal complex CC79 colonizing migratory and captive aquatic birds in a Brazilian Zoo” na revista Science of the Total Environment (ver item 4.1.).

### 3.7. Medicina de precisão em Doenças Negligenciadas e neurológicas

Análises em escala genômica tem um papel fundamental na descoberta de variantes associadas com doenças, uma vez que permitem caracterizar em larga escala a variabilidade genética em diferentes pacientes através das tecnologias de NGS (Next-Generation Sequencing). Além disso, permite analisar de forma abrangente, o repertório de variantes em um único indivíduo, possibilitando o diagnóstico molecular das predisposições em desenvolver doenças. Nesse sentido, a Medicina de Precisão surge como uma alternativa para um diagnóstico molecular eficaz, abrangente e personalizado. Esta é uma abordagem multidisciplinar que envolve áreas do conhecimento tais como Medicina, Genética, Genômica, Farmacologia, Computação, dentre outras.

Neste ano destacamos o estudo nas imunodeficiências primárias são doenças genéticas raras que têm como principal característica alterações das funções do sistema imune, levando à maior suscetibilidade às infecções de repetição, autoimunidade e neoplasias. A criança com imunodeficiência primária, embora relativamente rara, é um paciente de alto custo para o SUS, devido a dificuldades diagnósticas, requer o uso de antibioticoterapia e internações prolongadas que em muitos casos evoluem a óbito.

Além disso, estamos pesquisando pacientes com Deficiência Intelectual, pacientes que foram

infectados com Zika e Chikungunya com o objetivo de compreender os mecanismos que afetam o desenvolvimento neurológicos e motor.

Destacamos a publicação do artigo intitulado “Molecular alterations in the extracellular matrix in the brains of newborns with congenital Zika syndrome” no periódico Science Signaling (ver item 4.1.).

#### 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

##### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

1. MESSIAS, CAROLINA V. ; LOSS-MORAIS, GUILHERME ; CARVALHO, JOSEANE BISO DE ; GONZÁLEZ, MARIELA N. ; CUNHA, DANIELA P. ; VASCONCELOS, ZILTON ; ARGE, LUIS W. P. ; FARIAS-DE-OLIVEIRA, DÉCIO A. ; GERBER, ALEXANDRA L. ; PORTARI, ELYZABETH A. ; FERREIRA, NILMA ; RAPHAEL, LIDIANE M. S. ; BONALDO, MYRNA C. ; RIEDERER, INGO ; LOPES MOREIRA, MARIA E. ; COTTA-DE-ALMEIDA, VINICIUS ; VASCONCELOS, ANA T. R. ;

MENDES-DA-CRUZ, DANIELLA A. ; SAVINO, WILSON . Zika virus targets the human thymic epithelium. *Scientific Reports*, v. 10, p. 1-17, 2020.

2. NARCISO, ANA CLARA ; MARTINS, WILLAMES M.B.S. ; ALMEIDA, LUIZ G.P. ; CAYÔ, RODRIGO ; SANTOS, STÉFANIE VANESSA ; RAMOS, PATRÍCIA LOCOSQUE ; LINCOPAN, NILTON ; VASCONCELOS, ANA TEREZA R. ; GALES, ANA CRISTINA . Healthcare-associated carbapenem-resistant OXA-72-producing *Acinetobacter baumannii* of the clonal complex CC79 colonizing migratory and captive aquatic birds in a Brazilian Zoo. *SCIENCE OF THE TOTAL ENVIRONMENT*, v. 726, p. 138232, 2020.

3. AGUIAR, RENATO S. POHL, FABIO MORAIS, GUILHERME L. NOGUEIRA, FABIO C. S. CARVALHO, JOSEANE B. GUIDA, LETÍCIA ARGE, LUIS W. P. MELO, ADRIANA MOREIRA, MARIA E. L. CUNHA, DANIELA P. GOMES, LEONARDO PORTARI, ELYZABETH A. VELASQUEZ, ERIKA MELANI, RAFAEL D. PEZZUTO, PAULA DE CASTRO, FERNANDA L. GEDDES, VICTOR E. V. GERBER, ALEXANDRA L. AZEVEDO, GIRLENE S. SCHAMBERREIS, BRUNO L. GONÇALVES, ALESSANDRO L. JUNQUEIRA-DE-AZEVEDO, INÁCIO NISHIYAMA, MILTON Y. HO, PAULO L. SCHANOSKI, ALESSANDRA S. , et al. ; Molecular alterations in the extracellular matrix in the brains of newborns with congenital Zika syndrome. *Science Signaling*, v. 13, p. eaay6736, 2020. Citações:1

4. PIERRY, PAULO M. ; DE SANTANA, WESLEY OLIVEIRA ; KITAJIMA, JOÃO PAULO ; MARTINS-JUNIOR, JOAQUIM ; ZAINI, PAULO ; UCEDA-CAMPOS, GUILLERMO ; FEITOSA-JUNIOR, OSÉIAS R. ; PESSOA, PATRÍCIA ISABELA SILVA ; COLETTA- FILHO, HELVÉCIO ; DE SOUZA, ALESSANDRA ALVES ; MACHADO, MARCOS ANTONIO ; GESTEIRA, A. S. ; MARTINS, LAYLA FARAGE ; AMARAL, MURILO SENA ; BECKEDORFF, FELIPE ; DE ALMEIDA, LUIZ GONZAGA PAULA ; DE VASCONCELOS, ANA TEREZA RIBEIRO ; VERJOVSKI-ALMEIDA, SERGIO ;

SETUBAL, JOÃO CARLOS ; DA SILVA, ALINE MARIA . High-quality draft genome sequence resources of eight strains isolated from citrus, coffee, plum and hibiscus in South America.. *PHYTOPATHOLOGY*, v. 1, p. PHYTO-05-20-0162-A-12, 2020.

5. OCAÑA, KARY A.C.S. ; GALHEIGO, MARCELO ; OSTHOFF, CARLA ; GADELHA, LUIZ M.R. ; PORTO, FABIO ; GOMES, ANTÔNIO TADEU A. ; DE OLIVEIRA, DANIEL

; VASCONCELOS, ANA TEREZA . BioinfoPortal: A scientific gateway for integrating bioinformatics applications on the Brazilian national high-performance computing network. *Future Generation Computer Systems*, v. 107, p. 192-214, 2020.

6. DEBARBA, JOÃO ANTONIO ; SEHABIAGUE, MARTÍN PABLO CANCELA ; MONTEIRO, KARINA MARIANTE ; GERBER, ALEXANDRA LEHMKUHL ; VASCONCELOS, ANA TEREZA RIBEIRO ; FERREIRA, HENRIQUE BUNSELMAYER ; ZAHA, ARNALDO . Transcriptomic Analysis of the Early Strobilar Development of *Echinococcus granulosus*. PATHOGENS, v. 9, p. 465, 2020.
7. PALUDO, GABRIELA PRADO ; THOMPSON, CLAUDIA ELIZABETH ; MIYAMOTO, KENDI NISHINO ; GUEDES, RAFAEL LUCAS MUNIZ ; ZAHA, ARNALDO ; DE VASCONCELOS, ANA TEREZA RIBEIRO ; CANCELA, MARTIN ; FERREIRA, HENRIQUE BUNSELMAYER . Cestode strobilation: prediction of developmental genes and pathways. BMC GENOMICS, v. 21, p. 1-12, 2020.
8. CANDIDO, DARLAN S. CLARO, INGRA M. DE JESUS, JAQUELINE G. SOUZA, WILLIAM M. MOREIRA, FILIPE R. R. DELLICOUR, SIMON MELLAN, THOMAS A. DU PLESSIS, LOUIS PEREIRA, RAFAEL H. M. SALES, FLAVIA C. S. MANULI, ERIKA R. THÉZÉ, JULIEN ALMEIDA, LUIZ MENEZES, MARIANE T. VOLOCH, CAROLINA M. FUMAGALLI, MARCILIO J. COLETTI, THAÍS M. DA SILVA, CAMILA A. M. RAMUNDO, MARIANA S. AMORIM, MARIENE R. HOELTGEBAUM, HENRIQUE H. MISHRA, SWAPNIL GILL, MANDEV S. CARVALHO, LUIZ M. BUSS, LEWIS F. , et al. ; Evolution and epidemic spread of SARS-CoV-2 in Brazil. SCIENCE, v. 369, p. eabd2161, 2020. Citações:7
9. BOETTGER, BRUNO C. ; CAYÔ, RODRIGO ; STRELING, ANA PAULA ; NODARI, CAROLINA S. ; ALMEIDA, LUIZ G.P. ; MARTINS, WILLAMES M.B.S. ; GIRARDELLO, RAQUEL ; VASCONCELOS, ANA TEREZA R. ; GALES, ANA C. ; PIGNATARI, ANTONIO C.C. . Dynamic of High-Risk Major Clones in a Brazilian Tertiary Hospital During a Short Time Period. Microbial Drug Resistance, v. 26, p. mdr.2020.0195, 2020.
10. PIERGIORGE, RAFAEL MINA ; DE VASCONCELOS, ANA TEREZA RIBEIRO ; GONÇALVES PIMENTEL, MÁRCIA MATTOS ; SANTOS-REBOUÇAS, CÍNTIA BARROS . Strict network analysis of evolutionary conserved and brain-expressed genes reveals new putative candidates implicated in Intellectual Disability and in Global Development Delay. WORLD JOURNAL OF BIOLOGICAL PSYCHIATRY, v. 21, p. 1-34, 2020.
11. MARTINS, WILLAMES M. B. S. ; NICOLAS, MARISA F. ; YU, YANG ; LI, MEI ; DANTAS, PRISCILA ; SANDS, KIRSTY ; PORTAL, EDWARD ; ALMEIDA, LUIZ G. P. ; VASCONCELOS, ANA TEREZA R. ; MEDEIROS, EDUARDO A. ; TOLEMAN, MARK A. ; WALSH, TIMOTHY R. ; GALES, ANA C. ; ANDREY, DIEGO O.. Clinical and Molecular Description of a High-Copy IncQ1 KPC-2 Plasmid Harbored by the International ST15 Clone. mSphere, v. 5, p. 1-10, 2020.
12. LIMA, ANDRESSA R O ; CARDOSO, CYNTHIA C ; BENTIM, PRISCILLA R B ; VOLOCH, CAROLINA M ; ROSSI, ÁTILA D ; DA COSTA, RAISSA MIRELLA M S C ; DA PAZ, JULIANA APARECIDA S ; AGOSTINHO, RAFAEL F ; FIGUEIREDO, VALÉRIA R F S ; JÚNIOR, JARBA S S ; DE ALMEIDA, LUIZ G P ; GERBER, ALEXANDRA L ; ABUASSI, CLARISSA A ; RODRIGUES, NATALIA F ; TANURI, AMILCAR ; BOZZA, PATRICIA T ; BASTOS, CESAR S ; DE VASCONCELOS, ANA TEREZA R ; KRUGER, STELLA BEATRIZ ; VALLIM, GIOVANNA GEÓRGIA P C A ; NISHIHARA, ROBERTO J ; BARROSO, SHANA PRISCILA C ; MORROT, ALEXANDRE . Maternal SARS-CoV-2 infection associated to systemic inflammatory response and pericardial effusion in the newborn: a Case-Report. Journal of the Pediatric Infectious Diseases Society, v. 9, p. 1-9, 2020.
13. R. CERQUEIRA, FABIO ; VASCONCELOS, ANA TEREZA RIBEIRO . OCCAM: prediction of small ORFs in bacterial genomes by means of a target-decoy database approach and machine learning techniques. Database-The Journal of Biological Databases and Curation, v. 2020, p. 1-15, 2020.

14. FENG, SHAOHONG STILLER, JOSEFIN DENG, YUAN ARMSTRONG, JOEL FANG, QI REEVE, ANDREW HART XIE, DUO CHEN, GUANGJI GUO, CHUNXUE FAIRCLOTH, BRANT C. PETERSEN, BENT WANG, ZONGJI ZHOU, QI DIEKHANS, MARK CHEN, WANJUN ANDREU-SÁNCHEZ, SERGIO MARGARYAN, ASHOT HOWARD, JASON TRAVIS PARENT, CAROLE PACHECO, GEORGE SINDING, MIKKEL-HOLGER S. PUETZ, LARA CAVILL, EMILY RIBEIRO, ÂNGELA M. ECKHART, LEOPOLD , et al. ; Dense sampling of bird diversity increases power of comparative genomics. *NATURE*, v. 587, p. 252-257, 2020.

15. GUEDES, THAYLON ; JESUS, LEONARDO A. ; OCAÑA, K.A.C.S. ; DRUMMOND, LUCIA M. A. ; OLIVEIRA, D. C. M. . Provenance-based fault tolerance technique recommendation for cloud-based scientific workflows: a practical approach. *Cluster Computing-The Journal of Networks Software Tools and Applications*, v. 23, p. 123- 148, 2020.

16. MARLA MENDES, ISABELA ALVIM, VICTOR BORDA, EDUARDO TARAZONA-SANTOS. The history behind the mosaic of the Americas, *Current Opinion in Genetics & Development*, Volume 62, Pages 72-77, 2020.

17. VICTOR BORDA , ISABELA ALVIM MARLA M AQUINO , CAROLINA SILVA , GIORDANO B, SOARES-SOUZA , THIAGO P LEAL , MARILIA O SCLiar , ROXANA ZAMUDIO , CAMILA ZOLINI , CARLOS PADILLA , OMAR CÁCERES , KELLY LEVANO , CESAR SANCHEZ , OMAR TRUJILLO , PEDRO O., FLORES- VILLANUEVA , MICHAEL DEAN , SILVIA FUSELLI , MOARA MACHADO , PEDRO

E. ROMERO ,FRANCESCA TASSI , MEREDITH YEAGER , TIMOTHY D. O'CONNOR

, ROBERT H GILMAN, EDUARDO TARAZONA-SANTOS , HEINNER GUIO. The

genetic structure and adaptation of Andean highlanders and Amazonian dwellers is influenced by the interplay between geography and culture, *PNAS*, 2020.

18. MANCÍLIO, LUCCA BONJY KIKUTI ; RIBEIRO, GUILHERME AUGUSTO ; LOPES, ERICA MENDES ; KISHI, LUCIANO TAKESHI,; MARTINS-SANTANA, LEONARDO ; DE SIQUEIRA, GUILHERME MARCELINO VIANA ; ANDRADE, ADALGISA RODRIGUES ; GUAZZARONI, MARÍA-EUGENIA ; REGINATTO, VALERIA . Unusual microbial community and impact of iron and sulfate on microbial fuel cell ecology and performance. *Current Research in Biotechnology*, v. 2, p. 64-73, 2020.

19. PEREIRA, WALDIR EDUARDO SIMIONI ; DA SILVA, RONIVALDO RODRIGUES ; DE AMO, GABRIELA SALVADOR ; RULLER, ROBERTO ; KISHI, LUCIANO TAKESHI ; BOSCOLO, MAURÍCIO ; GOMES, ELENI ; DA SILVA, ROBERTO . A Collagenolytic Aspartic Protease from *Thermomucor indicae-seudaticae* Expressed in *Escherichia coli* and *Pichia pastoris*. *APPLIED BIOCHEMISTRY AND BIOTECHNOLOGY*, v. 191, p. 1258–1270, 2020.

#### 4.2. Livros e Capítulos de Livros

NICOLÁS, MARISA FABIANA; DE OLIVEIRA CERQUEIRA E COSTA, MAIANA ; RAMOS, PABLO IVAN P. ; DOS SANTOS, MARCELO TRINDADE; PEREZ-RUEDA, ERNESTO; MARTI, MARCELO A.; DO PORTO, DARIO

FERNANDEZ; TURJANSKI, ADRIAN G. Integrating Omics Data to Prioritize Target Genes in Pathogenic Bacteria. In: Fabricio Alves Barbosa da Silva; Nicolas Carels; Marcelo Trindade dos Santos; Francisco José Pereira Lopes. (Org.). *Computational Biology*. 1ed.: Springer International Publishing, 2020, v. 32, p. 217-276. ISSN 1568-2684, ISSN 2662-2432 (electronic), ISBN 978-3-

030-51862-2 (eBook), <https://doi.org/10.1007/978-3-030-51862-2>.

### 4.3. Edição de livro

Sem registros no ano corrente.

### 4.4. Participação em Eventos Científicos

#### 4.4.1. Palestras, seminários à Convite

[Palestra] "Bioinformática e Biologia Computacional" - Evento: Hackcovid-19 (09/05/20) Ana Tereza Vasconcelos - [Hackcovid19 - COVID-19 - Bioinformática e Biologia Computacional](#)

[Palestra] "Vigilância Genômica e sua importância na pandemia da Covid-19" - Evento: "40 anos do LNCC". Ana Tereza Vasconcelos - [28/05 Colóquio LNCC 40 anos - Mauricio Barreto \(Cidacs - Fiocruz, UFBA\) e Ana T. Vasconcelos \(LNCC\)](#)

[Simpósio] "A genômica do Sars-CoV-2" Evento: Simpósio SBG Genética Viva! Keynote speaker Ana Tereza Vasconcelos - ([Simpósio 17/09/2020](#))

[Congresso] "Genomics and Bioinformatics at LNCC From virus to human genome through bioinformatics" Evento: 1st Latin American Congress of Women in Bioinformatics and Data Science 2020 (23/09/20). Keynote speaker Ana Tereza Vasconcelos - <https://womenbioinfodatascla.github.io/speakers.html#>

[Congresso] II Congresso de Biologia Química e III Simpósio de Ciências Biológicas da UNIFESP. Keynote speaker Ana Tereza Vasconcelos (26/10/20) - <https://cppgbq.blogspot.com/>

[Palestra] Evento: 2o Encontro Fluminense de Mulheres em Biomatemática. Keynote speaker Ana Tereza Vasconcelos. [2o Encontro Fluminense de Mulheres em Biomatemática - EFMB - dia 10/11/2020](#)

[Congresso] "How to Prioritize Molecular Targets in Pathogens through Bioinformatics" Evento: 1st Latin American Congress of Women in Bioinformatics and Data Science 2020 (23/09/20). Keynote speaker Marisa Nicolas - <https://womenbioinfodatascla.github.io/speakers.html#>

[Palestra] "Variações não sinônimas de SARS-CoV-2 e impacto no desenvolvimento de fármacos e vacinas" - Evento: "40 anos do LNCC". Marisa Nicolás - [08/06/2020 - Seminário LNCC 40 anos - Laurent Dardenne e Marisa Nicolás \(LNCC/MCTIC\)](#)

Palestra no Seminário da pós-graduação em Nanobiosistemas. Data 02/09/2020, "Computação de Alto Desempenho em Filogenômica e Filodinâmica Computacional aplicada a Doenças Infecciosas Emergentes". (Kary Ocaña).

Palestra no Projeto de extensão do CEFET/RJ intitulado SEIC - Seminários da Escola de Informática & Computação. Data 17/09/2020. "Portais científicos para bioinformática: Experiências no Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho". (Kary Ocaña). Página CEFET (<https://eic.cefet-rj.br/seminarios/seic/portais-cientificos-para-bioinformatica-experiencias-no-sistema-nacional-de-processamento-de-alto-desempenho>). Youtube (<https://www.youtube.com/watch?v=DxIXwkQQynI>)

#### 4.4.2. Como Ouvinte/ Participante:

1. [Congresso] 24th International Conference on Research in Computational Molecular Biology. 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot
2. [Congresso] Bioinformatics: from Algorithms to Applications 2020 conference (BiATA). 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot
3. [Simpósio] First Virtual Meeting of Systematic, Biogeography & Evolution (SBE). Phylogenomic species tree of Virus Retrotransposons. 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot
4. [Simpósio] First Virtual Symposium on Phylogenomics and Comparative Genomics held by IBE researchers. 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot
5. [Oficina] International School on Big Data and Epigenomics applied to Public Health. 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot
6. [Congresso] CSBC 2020 - XIV Brazilian e-Science Workshop (BreSci 2020). High-Performance Computing of BEAST/BEAGLE in Bayesian Phylogenetics using SDumont Hybrid Resources. 2020. Kary Ann Del Carmen Ocaña Gautherot  
Participação como ouvinte e autor, com trabalho completo e apresentação oral aceitos.

#### 5. Atividades Projetadas para 2021

Em 2020, as atividades de pesquisa desenvolvidas pelo LABINFO estiveram alinhadas principalmente com as diretrizes do Plano de Ação de CT&I para Saúde da Estratégia Nacional de CT&I (ENCTI), com atuação no enfrentamento da COVID-19 bem como no estudo de dengue, zika, chikungunya, febre amarela, mayaro e Oropouche e no estudo de resistência antimicrobiana em Saúde Única.

Para 2021, o LABINFO continuará tendo forte atuação no enfrentamento da COVID-19. Os estudos de vigilância genômica viral prosseguirão, além de estudos envolvendo o sequenciamento e análise de diferentes amostras de pacientes acometidos pela COVID-19 que visam identificar fatores genéticos do vírus e do hospedeiro e que possam contribuir para o tratamento da doença. Para tanto, o LABINFO tem aprovado projetos no qual atuará em rede com diversas instituições nacionais e será responsável não só pelas etapas de sequenciamento e análise como também pela integração de diferentes camadas ômicas em uma plataforma computacional disponível para a comunidade científica. Estudos sobre o vírus e a interação vírus-hospedeiro tanto da Zika, Chikungunya como de outras arboviroses continuarão em andamento visando a compreensão dos mecanismos moleculares e genéticos envolvidos no processo da doença e suas consequências clínicas.

O LABINFO está desenvolvendo uma plataforma computacional que integrará diferentes dados ômicos e metadados para estruturação de um banco de dados, permitindo acesso e processamento rápido da informação. Para tal, contaremos com a infraestrutura do Supercomputador Santos Dumont e da utilização de ferramentas de Inteligência Artificial para gerenciamento, otimização e processamento rápido das análises. Esta plataforma poderá ser empregada para o estudo de futuras epidemias, além dos atuais estudos em COVID-19 e arboviroses.

Ainda na área da saúde, através da abordagem metagenômica, estudos de resistência antimicrobiana em Saúde Única serão continuados visando a implantação de uma Rede Brasileira de Vigilância de Resistência Antimicrobiana.

O projeto abordagem integrativa e multi-ômica na priorização de alvos contra patógenos de importância clínica combinando técnicas de bioinformática e biotecnologia deverá ter suas atividades iniciadas com a previsão de missões entre os grupos de pesquisa brasileiros, argentinos e mexicanos. Além da continuidade dos estudos que já vem sendo conduzidos utilizando abordagem multi-ômica e modelagem de redes biológicas para priorizar alvos em patógenos clínicos.

Estudos de alteração de expressão gênica em células tumorais ocasionadas pelo peptídeo Lunasina em formulação com nanopartícula utilizando a técnica de RNA-Seq estão sendo conduzidos em colaboração com a Faculdade de Farmácia da UFRJ. Para 2021 temos a previsão de ter o pipeline completo para análise dos dados de transcrito. No entanto, esse estudo depende de experimentos laboratoriais que serão conduzidos na faculdade de Farmácia da UFRJ e no Campus de Xerém. Assim, dependendo da situação de pandemia, os estudos poderão ser atrasados.

Na área ambiental estão em desenvolvimento dois projetos junto a Petrobrás, ambos sendo realizados na Bacia de Santos, o metapetro, coordenado pelo LABINFO, e o PCR-BS, coordenado pela USP. Estudos taxonômicos e funcionais, bem como de abundância de organismos e montagem de genomas a partir de metagenomas (MAGs) em amostras de sedimento, água, coral e rodolitos, em áreas influenciadas pela indústria de óleo e gás utilizando abordagens baseadas em DNA, como a metagenômica e a *metabarcoding* serão conduzidos em 2021. O pipeline para análise das amostras metagenômicas e montagem de MAGs já foi incorporado ao SABIA.

O LABINFO tem atuado nas análises e perfilamento do desempenho usando Computação de Alto Desempenho (CAD) que permitem descobrir gargalos e visam o uso racional do ambiente Santos Dumont. Aplicações e workflows de bioinformática permeiam cenários com diferentes desafios devido a parametrização da aplicação, tipo de ambiente computacional e natureza do particionamento dos dados. Foram identificados alguns cenários relacionados com diversos níveis de paralelismo, atualmente sendo explorados no Santos Dumont, como por ex: recursos híbridos em análise filogenética bayesiana do BEAST/BEAGLE, recursos multinúcleos em CPU em análises de verossimilhança do RAXML, parametrização multithreading competitiva do Bowtie/Parsl do workflows em RNASeq, entre outros cenários. Os resultados desses cenários devem ser reinvestidos no sistema do Portal-Bioinfo. Em 2021 temos como perspectiva, em colaboração com os grupos SINAPAD e CENAPAD no LNCC, reinvestir os resultados obtidos dos diferentes cenários no sistema do Portal-Bioinfo.

Com relação a formação de recursos humanos, o LABINFO participa do programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC, bem como do programa de PG em Nanobiosistemas, do qual participam também as seguintes instituições: Biomanguinhos/Fiocruz, INMETRO e UFRJ (Campus Caxias e Faculdade de Farmácia) e do programa de Genética da UFRJ. Portanto, promove a formação e aperfeiçoamento de recursos humanos na área de Bioinformática e Biologia Computacional através de teses, dissertações, cursos e palestras. Além das disciplinas e palestras a serem ministradas nesses programas de PG em 2021, está prevista a orientação de alunos que venham a ingressar nos programas, e a condução de orientações que já se encontram em andamento.

## 6. Outras Informações Relevantes

Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos

Assessoria científica do Instituto Nacional de Comunicação da Ciência e Tecnologia (INCT-CPCT) – ação COVID 19. ([www.coronavirusdc.com.br](http://www.coronavirusdc.com.br))

### **Entrevista para imprensa:**

#### Vídeos

- RJ TV primeira edição: <https://globoplay.globo.com/v/8434632/>
- RJ TV segunda edição: <https://globoplay.globo.com/v/8436793/>
- Jornal Nacional: <https://globoplay.globo.com/v/8435270/>
- Bom dia RJ: <https://globoplay.globo.com/v/8436172/>
- SBT Brasil: <https://www.youtube.com/watch?v=NeXv22XkskA>
- Jornal da Cultura: [https://tvcultura.com.br/videos/73407\\_jornal-da-cultura-26-03-2020.html](https://tvcultura.com.br/videos/73407_jornal-da-cultura-26-03-2020.html)
- GloboNews Em Pauta: <https://g1.globo.com/globonews/globonews-em-pauta/video/cientistas-brasileiros-sequenciam-genomas-da-covid-19-e-confirmam-transmissao-local-no-br-8431928.ghtml>
- Jornal GloboNews Edição das 10: <https://g1.globo.com/globonews/jornal-globonews-edicao-das-10/video/pesquisa-encontra-mutacao-genetica-no-novo-coronavirus-8433492.ghtml>
- Canal “COVID19 Divulgação Científica” ([COVID19: o jeitinho brasileiro do novo coronavírus](#))

#### Matérias

- Faperj: <http://www.faperj.br/?id=3948.2.9>
- Fapemig: <https://fapemig.br/pt/noticias/344>
- G1 Região Serrana: <https://g1.globo.com/rj/regiao-serrana/noticia/2020/03/25/os-primeiros-19-genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-em-48h-no-lncc.ghtml>
- G1 - Bem Estar: <https://g1.globo.com/bemestar/coronavirus/noticia/2020/03/26/pesquisa-mostra-que-coronavirus-esta-aclimatado-no-brasil-e-reforca-necessidade-de-isolamento-diz-cientista.ghtml>
- Portal Acontece em Petrópolis: <http://www.aconteceempetropolis.com.br/2020/03/25/pesquisadores-do-lncc-ufmg-e-ufri-sequenciam-os-primeiros-19-genomas-do-covid-19/>
- Diário de Petrópolis (25/03): <https://www.diariodepetropolis.com.br/integra/pesquisares-do-lncc-sequenciam-genoma-do-covid-19-em-48-horas-179052?fbclid=IwAR2dNzovOYVFZZmYmjoy-Qr6THWNL6QYSJT-Diário de Petrópolis>
- Diário de Petrópolis (27/03): <https://www.diariodepetropolis.com.br/integra/genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-no-lncc-179096>
- Sou Petrópolis: <https://soupetropolis.com/2020/03/27/cientistas-explicam-a-importancia-da-pesquisa-feita-em-petropolis-com-o-novo-coronavirus/>
- O Globo: <https://oglobo.globo.com/sociedade/coronavirus/transmissao-comunitaria-genoma-mostra-que-novo-coronavirus-adquiriu-caracteristicas-singulares-no-brasil-24328953>

- UOL - Viva Bem: <https://www.uol.com.br/vivabem/noticias/redacao/2020/03/26/pesquisadores-sequenciam-genomas-do-coronavirus.htm>
- UFMG: <https://ufmg.br/comunicacao/noticias/pesquisadores-de-ufmg-ufri-e-lncc-sequenciam-genoma-de-19-exemplares-do-covid-19>
- BandNews FM: <http://www.bandnewsfm.com.br/2020/03/26/novo-coronavirus- adquire- caracteristicas-singulares-no-brasil-apos-um-mes-diz-cientista-que-coordena-mapeamento/>
- pais&filhos: <https://paisefilhos.uol.com.br/familia/cientistas-provam-que-coronavirus- sofreu- mutacao-no-brasil-e-reforcam-importancia-do-isolamento-social/>
- Metr p les: <https://www.metropoles.com/saude/coronavirus-ja-passou-por- mutacoes-no- brasil-aponta-pesquisa>
- Catraca Livre: <https://catracalivre.com.br/saude-bem-estar/sequenciamento-de- genomas- mostra-que-coronavirus-sofreu-mutacoes-no-brasil/>
- Canaltech: <https://canaltech.com.br/saude/mutacao-do-novo-coronavirus-entre- humanos- e-baixa-afirmam-cientistas-162416/>
- Estado de Minas Gerais: [https://www.em.com.br/app/noticia/gerais/2020/03/25/interna\\_gerais,1132300/ufmg-e-ufri- sequenciam-genoma-de-coronavirus-em-pacientes-de-5-estados.shtml](https://www.em.com.br/app/noticia/gerais/2020/03/25/interna_gerais,1132300/ufmg-e-ufri- sequenciam-genoma-de-coronavirus-em-pacientes-de-5-estados.shtml)
- CartaCapital: <https://www.cartacapital.com.br/saude/cientistas-sequenciam- genomas-do- coronavirus-em-tempo-recorde/>
- BHAZ: <https://bhaz.com.br/2020/03/27/pesquisadores-ufmg-genoma-coronavirus/>
- APUFSC Sindical: <http://www.apufsc.org.br/2020/03/26/genoma-mostra-que-o-novo- coronavirus-adquiriu-caracteristicas-singulares-no-brasil/>
- JM Online: <https://jmonline.com.br/novo/?noticias,7,SA%C3%9ADE,194244>
- VARELA Not cias: <https://varelanoticias.com.br/estudo-mostra-que-coronavirus- sofreu- mutacao-genetica-no-brasil/>
- Jovem Capital: <https://www.jovemcapital.com.br/noticia2/75799/pesquisa-mostra- que- coronavirus-esta-39aclimatado39-no-brasil-e-reforca-necessidade-de-isolamento-diz- cientista>
- Hoje em Dia: <https://www.hojeemdia.com.br/horizontes/pesquisadores-da-ufmg- sequenciam-genomas-da-covid-19-de-pacientes-em-cinco-estados-1.780276>
  - Panorama Farmac utico: <https://panoramafarmaceutico.com.br/2020/03/27/pesquisadores-sequenciam- genomas/>
  - O Tempo: <https://www.otempo.com.br/cidades/mapeamento-mostra-que- coronavirus-ja-adquiriu-caracteristicas-proprias-no-brasil-1.2316842>
  - Studio.FM: <https://www.radiostudiofm.com.br/noticia2/75183/os-primeiros-19- genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-em-48-horas-no-lncc>
  - O Povo Online: <https://www.opovo.com.br/coronavirus/2020/03/26/coronavirus- sofreu-mutacoes-no-brasil-apos-inicio-da-transmissao-comunitaria.html>
  - RomaNews: <https://www.romanews.com.br/coronavirus/mapeamento-de-genoma- mostra-que-novo-coronavirus-ja-sofreu-mutacoes-no/73791/>
  - LF News: <https://lfnews.com.br/estudo-mostra-que-coronavirus-sofreu-mutacao- genetica-no-brasil/>

- Diário Online: <https://www.diarioonline.com.br/noticias/brasil/580055/coronavirus-se-tornou-mutante-no-brasil-nao-teremos-remedios-para-salvar-vitimas>
- Primeiro a Saber: <https://primeiroasaber.com.br/2020/03/26/cientistas-sequenciam-genomas-do-coronavirus-em-minas-gerais1/>
- Petrolândia Conectada: <https://petrolandiaconectada.blogspot.com/2020/03/pesquisadores-brasileiros-sequenciam-19.html>
- UOL Tilt Ciência: <https://www.uol.com.br/tilt/noticias/redacao/2020/03/27/brasileiros-buscam-cura-para-coronavirus-desde-janeiro-e-ja-tem-5-candidatos.htm>
- Jornal Priemeira Hora: <https://www.cidadenordestes.com.br/2020/03/pesquisadores-brasileiros-sequenciam-19.html>
- Tribuna de Petrópolis: <https://tribunadepetropolis.com.br/pesquisadores-sequenciam-19-genomas-do-covid-19-no-laboratorio-do-Incc->
- Agência Brasil EBC: <https://agenciabrasil.ebc.com.br/saude/noticia/2020-03/pesquisadores-brasileiros-avancam-no-sequenciamento-do-coronavirus#>
- Folha Pe: <https://www.folhape.com.br/noticias/noticias/coronavirus/2020/03/30/NWS.135316.70.1668,NOTICIAS,2190-PESQUISADORES-COMECAM-DECIFRAR-IDENTIDADE-NOVO-CORONAVIRUS-BRASIL.aspx>
- Serra Verde: <http://www.serraverdefm.com.br/noticia/225/pesquisadores-do-Incc-em-petropolis-sequenciam-19-genomas-do-novo-coronavirus-em-48-horas/>
- O Fluminense: <https://www.ofluminense.com.br/editorias/atualidades/2020/03/1137257-genoma-do-novo-coronavirus.html>
- Rádio Top Samba: <https://www.radiotopsamba.com.br/noticia2/76202/pesquisa-no-Incc-revela-que-coronavirus-ja-sofreu-mutacao-no-brasil-e-comprova-transmissao-comunitaria-no-pais>
- Notícias de São Pedro da Aldeia: <https://noticiasdesaopedrodaaldeia.com.br/pesquisa-Incc-revela-coronavirus/>
- MSN: <https://www.msn.com/pt-br/estilo-de-vida/lifestylegeneral/sequenciamento-de-genomas-mostra-que-coronav%C3%ADrus-sofreu-muta%C3%A7%C3%B5es-no-brasil/ar-BB11K7bu>
- Diário do Comércio: <https://diariodocomercio.com.br/coronavirus/pesquisadores-sequenciam-genomas/>
- Rádio Bikurin: <https://bikurin.com/noticia2/75183/os-primeiros-19-genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-em-48-horas-no-Incc>
- Blog do BG: <https://www.blogdobg.com.br/mapeamento-de-genoma-mostra-que-novo-coronavirus-ja-adquiriu-caracteristicas-proprias-no-brasil/>

- Rádio Educativa: <https://www.radioeducativafm.com.br/noticia2/75183/os-primeiros-19-genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-em-48-horas-no-Incc>
- APUFSC: <https://www.apufsc.org.br/2020/03/26/genoma-mostra-que-o-novo-coronavirus-adquiriu-caracteristicas-singulares-no-brasil/>
- Luciana Pombo: <https://lucianapombo.com.br/noticia/14678/sequenciamento-de-genomas-mostra-que-coronavirus-sofreu-mutacoes-no-brasil>
- Rodrigo Matarazzo: <https://www.rodriгомatarazzo.com/noticia/15880/os-primeiros-19-genomas-do-covid-19-sao-sequenciados-em-48-horas-no-Incc.html>
- Vale do Piancó: <https://valedopianconoticias.com.br/noticia/sequenciamento-de-genomas-mostra-que-coronavirus-sofreu-mutacoes-no-brasil>
- Lider FM: <https://tonalider.com.br/noticia/121151/pesquisadores-da-ufmg-sequenciam-genomas-da-covid-19>
- Folha de Dourados: <https://www.folhadedourados.com.br/noticias/brasil-mundo/transmissao-comunitaria-cientistas-sequenciam-genoma-do-novo-coronavirus-no-brasil>
- Últimas Notícias: <https://www.ultimasnoticias.inf.br/noticia/pesquisadores-da-ufmg-sequenciam-genomas-da-covid-19-de-pacientes-em-cinco-estados/>
- Portal da Cidade Guaxupé: <https://guaxupe.portaldacidade.com/noticias/regiao/cientistas-sequenciam-genomas-do-coronavirus-em-minas-gerais-3805>
- SRZD: <https://www.srzd.com/brasil/pesquisadores-brasileiros-avancam-sequenciamento-coronavirus/>
- Tribuna de Petrópolis <https://tribunadepetropolis.com.br/sequenciamento-do-genoma-de-mais-de-300-especies-de-aves-teve-como-uma-das-autoras-uma-pesquisadora-do-Incc-pesquisa-foi-publicada-na-revista-nature>

*Kary Ann Del Carmén Ocaña Gautherot*

- Comissão Julgadora do Hacklaton Online Evento: Hackcovid19. 05/06/2020. ([Cerimônia de Encerramento do Hackcovid19](#))

**Atividades previstas no PDU**

Número de genomas sequenciados em  
2020: 1007 Número de genomas  
analisados em 2020: 909



# GMMSB

MODELAGEM MOLECULAR DE SISTEMAS BIOLÓGICOS



*Laurent Emmanuel Dardenne*

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O GMMSB (Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos) é um grupo de pesquisa multidisciplinar do LNCC. Atua na área de modelagem molecular e tem como objetivo o desenvolvimento de métodos, algoritmos, programas e portais web nas seguintes linhas de pesquisa: (i) Planejamento de Fármacos Baseado em Estruturas e (ii) Predição de Estruturas de Proteínas. O grupo também tem como objetivo o desenvolvimento de projetos aplicados na área de planejamento de novos fármacos associados às seguintes doenças: doenças negligenciadas (e.g. doença de Chagas, Leishmaniosis), processos inflamatórios, doença de Alzheimer e câncer.”

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1 Equipe**

#### **1.1.1 Pesquisadores**

Laurent Emmanuel Dardenne (COMOD)

Fábio Lima Custódio (COMOD)

Hélio José Correa Barbosa (COMOD)

#### **1.1.2 Alunos e pós-Doutores**

- Pos-Doutores:

Isabella Alvim Guedes

Karina Baptista dos Santos

Doutorandos:

Paulo Werdt

Aaron Leão

Emerson Lima

Ana Luiza Martins Karl

Matheus Muller

- Mestrandos:

Lincon Vidal

Leon Côrrea Costa

#### **1.1.3 Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:

Camila Silva de Magalhães (UFRJ)

Priscila Capriles (UFJF)

Eduardo Krempser (FIOCRUZ-LNCC)

Douglas A. Augusto (FIOCRUZ-LNCC)

Gregório Kappaun (IFF-Macaé)

Obs. Estão listados apenas pesquisadores colaboradores membros do GMMSB

## 1.2 Pesquisa e Desenvolvimento

- **Tema 1: “Planejamento de Fármacos Baseado em Estruturas”**

Desenvolvimento de algoritmos, métodos, programas e portais web para a identificação e melhoria de moléculas ligantes candidatas a fármacos. Desenvolvimento de métodos de novo utilizando técnicas de Inteligência Computacional/Artificial.

- **Tema 2: “Predição de Estrutura e Engenharia de Proteínas”**

Desenvolvimento de algoritmos, métodos, programas e web servers para a predição de estrutura de proteínas e engenharia de proteínas (e.g., anticorpos).

- **Tema 3: “Pesquisa Aplicada no Planejamento de Fármacos”**

Pesquisa aplicada objetivando a identificação e melhoria de compostos protótipos candidatos a fármacos para o tratamento das seguintes doenças: doenças negligenciadas (e.g. doença de Chagas, Leishmaniosis), processos inflamatórios, doença de Alzheimer e câncer.

- **Tema 4: Imunoinformática**

Pesquisa objetivando a predição de epítomos utilizando técnicas de Inteligência Artificial.

## 1.3 Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação

Introdução a DNA e Proteínas (GA-043)

Bioquímica (GA-051)

“Modelagem Molecular de Biomacromoléculas por Dinâmica Molecular (GB-187)

Estrutura de Proteínas e Simulação Computacional de Macromoléculas Biológicas (GB-185)

Evolução (GB)

Aprendizagem de Máquina (GB)

- Mini-cursos / Escolas / Congressos

- Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos (Bi-anual, organizada no LNCC)

- Mini-curso sobre o Programa DockThor (eventualmente no Programa de Verão do LNCC)

## 2 Projetos de Pesquisa

### **2.1 “Desenvolvimento de Algoritmos e Sistemas Computacionais em Plataformas de Alto Desempenho para Predição de Estrutura de Proteínas e Planejamento de Fármacos”**

Coordenador: Prof. Helio José Corrêa Barbosa (LNCC/MCTIC)

Edital FAPERJ “Apoio a Projetos Temáticos no Estado do Rio de Janeiro 2019”.

Vigência: 18 meses (início novembro 2019)

Financiamento: R\$ 175.000,00

## **2.2 “Abordagem integrativa e multi-ômica na priorização de alvos contra patógenos de importância clínica combinando técnicas de bioinformática e biotecnologia”**

Coordenadora: Marisa Fabiana Nicolás (LNCC/MCTIC)

Vigência: 2020 – 2023

Edital CAPES/COOPBRASS

Financiamento: R\$ 1.121.536,00

Instituições envolvidas:

Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC)

Universidade Federal de São Paulo, Laboratório Especial de Microbiologia Clínica (LEMC/Alerta) (Unifesp)

Instituto Gonçalo Moniz (IGM), Fiocruz Bahia

Universidad de Buenos Aires (UBA) Argentina

“Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas (IIMAS)

Universidad Autónoma de México”

## **2.3 “Rede Fluminense para a Pesquisa e Desenvolvimento de Nanobiosistemas”**

Coordenador: Carlos Achete (INMETRO)

Vigência: 2019 – 2022

Edital FAPERJ/ Nanotecnologia

Financiamento: Projeto prevê 5 milhões para toda a rede (R\$ 47.232,70 para o GMMSB-LNCC)

Instituições envolvidas:

INMETRO

LNCC

UFRJ

PUC-RJ

UFF

Esta proposta visa a criação de uma rede de pesquisa fortemente interligada entre seis instituições (UFRJ, UFF, Inmetro, PUC, Fiocruz e LNCC) reconhecidas pela qualidade da formação de seus pesquisadores e estudantes, sua produção científica de qualidade e a vocação para interação com o meio industrial. Diversas equipes dessas instituições juntarão sua expertise e conhecimento para o desenvolvimento de nanomateriais e nanobiosistemas que apresentam potencial para a fabricação de nanodispositivos e nanoprodutos na área da saúde, para tecnologias de armazenamento e processamento de informação e para geração de energia limpas e preservação do meio ambiente. A criatividade resultando da sinergia entre pesquisadores atuantes em Ciência de Materiais, Ciências Biológicas e Farmacêuticas, Física, Química, Medicina, Modelagem Computacional e Bioinformática e de vários níveis de experiência (pesquisadores consolidados, em fase intermediária da carreira e jovens promissores) permitirá sem dúvida a geração de pesquisas de fronteira apresentando alto nível científico-tecnológico. É importante enfatizar que, além da geração de conhecimento, nossa proposta possui forte vocação para a inovação, uma vez que os laboratórios de praticamente todas as equipes envolvidas possuem programas oficiais de apoio a geração de empresas e produtos. Esse projeto contribuirá também para consolidação da nova pós-graduação em nanobiosistemas que envolve quatro instituições formando essa rede (UFRJ, INMETRO, LNCC e FIOCRUZ) e que visa a formação de pesquisadores qualificados aptos a proporem soluções sustentáveis usando a

nanociência e nanotecnologia para os desafios atuais e futuros na área da saúde e do meio ambiente, fundamentais para o país

#### **2.4 "Identificação de Alvos por Docagem Reversa Aplicada ao Estudo e Otimização Estrutural de Compostos Leishmanicidas e Tripanocidas"**

Coordenadores: Laurent E. Dardenne (LNCC) e Maurício Santana (UFRRJ)

Vigência: 2019 – 2022

Projeto dentro do INCT-INOVAR coordenado pelo prof. Eliezer Barreiro (UFRJ).

INSTITUTO NACIONAL DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA DE FARMACOS E MEDICAMENTOS (INCT-INOVAR) CNPq, Processo: 465.249/2014-0

Financiamento: R\$ 20.000,00

### **3 Destaques Científicos e Tecnológicos**

#### **3.1 Artigo publicado: "Highly Flexible Ligand Docking: Benchmarking of the DockThor Program on the LEADS-PEP Protein-peptide Dataset"**

Autores: Karina Baptista dos Santos, Isabella Guedes, Ana Luiza M. Karl e Laurent E. Dardenne

Journal of Chemical Information and Modeling

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00905>

#### **Resumo:**

"Protein-peptide interactions play a crucial role in many cellular and biological functions, which justify the increasing interest in the development of peptide-based drugs. However, predicting experimental binding modes and affinities in protein-peptide docking remains a great challenge for most docking programs due to some particularities of this class of ligands, such as the high degree of flexibility. In this paper, we present the performance of the DockThor program on the LEADS-PEP dataset, a benchmarking set composed of 53 diverse protein-peptide complexes with peptides ranging from 3 to 12 residues and with up to 51 rotatable bonds. The DockThor performance for pose prediction on redocking studies was compared with some state-of-the-art docking programs that were also evaluated on LEADS-PEP dataset: AutoDock, AutoDock Vina, Surflex, GOLD, Glide, rDock, and DINC, as well as to the task-specific docking protocol HPepDock. Our results indicate that DockThor could dock 40% of the cases with an overall backbone RMSD below 2.5 Å when the top-scored docking pose was considered, exhibiting similar results to Glide and outperforming other protein-ligand docking programs, whereas rDock and HPepDock achieved superior results. Assessing the docking poses closest to the crystal structure (*i.e.*, best-RMSD pose) DockThor achieved a success rate of 60% in pose prediction. Due to the great overall performance to handle with peptidic compounds, DockThor program can be considered as a suitable for docking highly flexible and challenging ligands, with up to 40 rotatable bonds. DockThor is freely available as a virtual screening web server at <https://www.dockthor.lncc.br/v2/>."

#### **3.2 Aprimoramento da nova versão do Portal DockThor-VS acoplado ao supercomputador Santos Dumont (<https://www.dockthor.lncc.br>)**

A figura 1 abaixo ilustra o uso do portal DockThor desde o lançamento da primeira versão (maio de 2013) até o presente.

## The DockThor Portal: a Free Protein-Ligand Docking Server

Guedes, I.A.<sup>1</sup>, Krempser, E.<sup>1</sup>, Marinho, D.<sup>2</sup>, de Magalhães, C.S.<sup>3</sup>, Dardenne, L.E.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos, Laboratório Nacional de Computação Científica – Petrópolis / RJ - Brasil

<sup>2</sup> Instituto de Ciências Biológicas - Universidade Federal do Pará – Pará / PA – Brasil

<sup>3</sup> Departamento de Matemática - Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro – Rio de Janeiro / RJ - Brasil

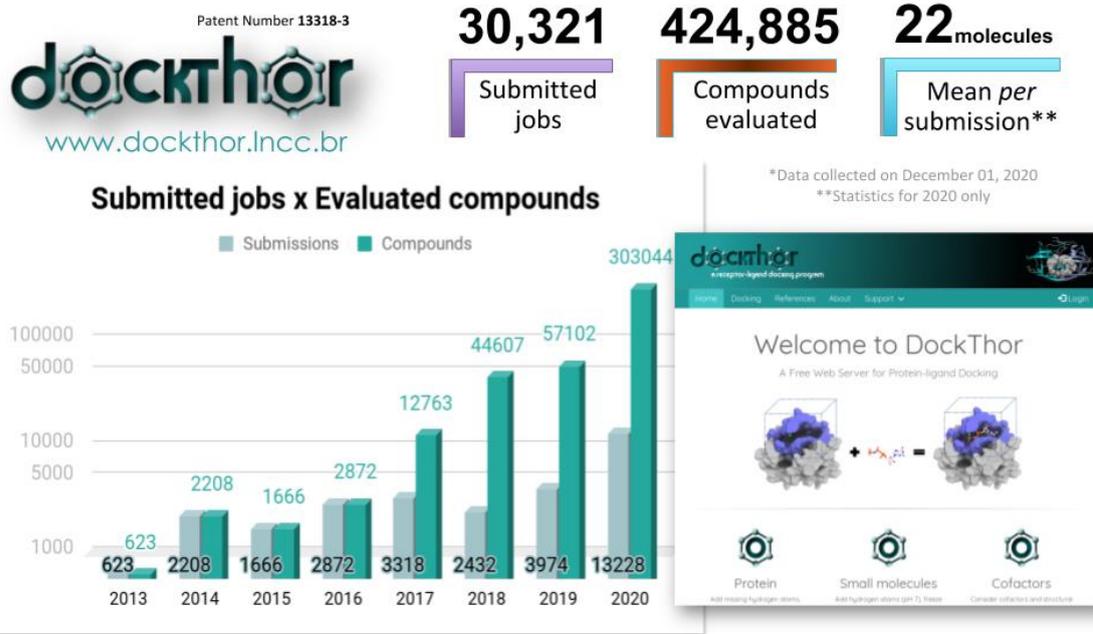
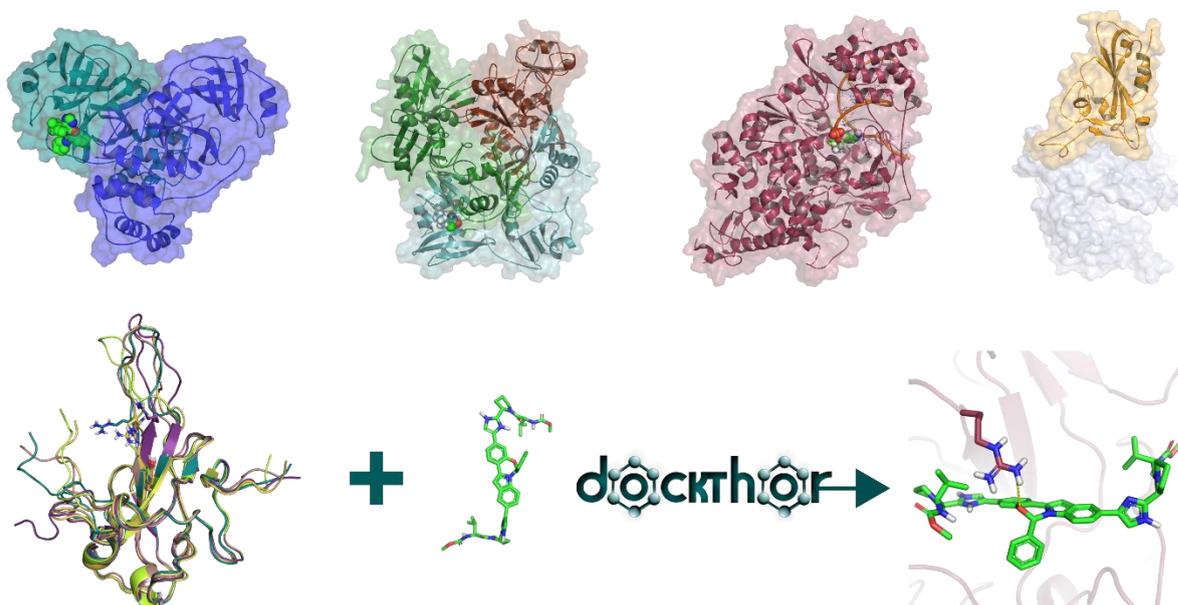


Figura1: Estatísticas de uso Portal DockThor-VS

O portal DockThor-VS teve no ano de 2020 (até a data de 30/12/2020) cerca de 13.228 jobs submetidos e 303.404 ligantes analisados. Cerca de 3,3 vezes o número de jobs submetidos em 2019.

Com os desenvolvimentos feitos em 2020, o portal DockThor-VS permite hoje experimentos de triagem virtual de até 200 compostos para usuários não cadastrados e de até 5.000 compostos para usuários cadastrados (com projetos submetidos e aprovados). Todos os jobs são submetidos ao supercomputador Santos Dumont.

**3.3 Alvos moleculares associados ao SARS-COV-2 foram disponibilizados no Portal DockThor-VS juntamente com bibliotecas para estudos de reposicionamento de fármacos.**



**Resumo:**

The COVID-19 caused by the SARS-CoV-2 virus was declared as a pandemic disease in March 2020 by the World Health Organization (WHO). Structure-Based Drug Design strategies based on docking methodologies have been widely used for both new drug development and drug repurposing to find effective treatments against this disease. In this work, we present the developments implemented in the DockThor-VS web server to provide a virtual screening (VS) platform with curated structures of potential therapeutic targets from SARS-CoV-2 incorporating genetic information regarding relevant non-synonymous variations. The web server facilitates repurposing VS experiments providing curated libraries of currently available drugs on the market. Currently, DockThor-VS provides ready-for-docking 3D structures for wild type and selected mutations for Nsp3 (papain-like, PLpro domain), Nsp5 (Mpro, 3CLpro), Nsp12 (RdRp), Nsp15 (NendoU), N protein and Spike. We performed VS experiments of FDA-approved drugs considering the therapeutic targets available at the web server to assess the impact of considering different structures and mutations in the identification of possible new treatments of SARS-CoV-2 infections. The DockThor-VS is freely available at [www.dockthor.incc.br](http://www.dockthor.incc.br).

*Preprint Publicado :*

**“Drug Design and Repurposing with DockThor-VS Web Server: Virtual Screening focusing on SARS-CoV-2 Therapeutic Targets and their Non-Synonym Variants”**

Isabella A Guedes, Leon SC Costa, Karina B dos Santos, Ana LM Karl, Gregório K Rocha, Iury M Teixeira, Marcelo M Galheigo, Vivian Medeiros, Eduardo Krempser, Fábio L Custódio, Helio JC Barbosa, Marisa F Nicolás, Laurent E Dardenne

Preprint publicado na Research Square

<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-96789/v1>

(Artigo também submetido para ScientificReports)

Neste artigo foi feito todo um estudo de reposicionamento de fármacos focando nos seis alvos moleculares de SARS-CoV-2.

Até o momento cerca de 1050 jobs foram submetidos no portal DockThor-VS utilizando os alvos de SARS-CoV-2 disponibilizados.

### **3.4 Título “HLA-independent T-cell Epitope Mapping Using a Convolutional Neural Network.”**

Autores: Fábio Lima Custódio e Raphael Trevizani

IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics (artigo submetido em fase de revisão)

### **3.5 Programa DockTDeep**

Um programa de computador, denominado de DockTDeep, foi desenvolvido com o objetivo de auxiliar o desenvolvimento e a aplicação de Funções Scoring, para predição de afinidade Receptor-Ligante, baseadas em técnicas aprendizado profundo (DL, do inglês deep learning). O programa é capaz de gerar diferentes representações moleculares de complexos proteína-ligante, baseadas em grades multidimensionais de voxels (tensores 4D). Outra função crucial do programa é possibilitar o gerenciamento de grandes conjuntos de dados de complexos proteína-ligante, de maneira adequada para o treinamento com algoritmos de DL.

Programa desenvolvido associado a dissertação de Mestrado de Matheus Muller.

Programa ainda sem registro.

**3.6 Participação na 14 edição do CASP (“Critical Assessment of Techniques for Protein Structure Prediction”-<https://www.predictioncenter.org/casp14/index.cgi>) na categoria Server utilizando o programa GAPP.**

## **4 Resultados Científicos e Tecnológicos**

### **4.1 Artigos Científicos em Periódicos**

1- **“Highly Flexible Ligand Docking: Benchmarking of the DockThor Program on the LEADS-PEP Protein-Peptide Data Set.”**

SANTOS, KARINA B. ; GUEDES, ISABELLA A. ; KARL, ANA L. M. ; DARDENNE, LAURENT E.

Journal of Chemical Information and Modeling

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00905>

2- **“An Expedient Synthesis of Tacrine-Squaric Hybrids as Potent, Selective and Dual-Binding Cholinesterase Inhibitors.”**

CESCHI, MARCO ; PILOTTI, RENAN ; LOPES, JOÃO ; DAPONT, HENRIQUE ; DA ROCHA, JOÃO ; AFOLABI, BLESSING ; GUEDES, ISABELLA ; DARDENNE, LAURENT

JOURNAL OF THE BRAZILIAN CHEMICAL SOCIETY

<http://dx.doi.org/10.21577/0103-5053.20200019>

**3- “Design, Synthesis and Biological Evaluation of Novel Triazole N-acylhydrazone Hybrids for Alzheimer’s Disease.”**

SILVA, M. F. ; LIMA, E. T. ; PRUCCOLI, L. ; CASTRO, N. G. ; GUIMARAES, M. ; SILVA, F. M. R. ; NADUR, N. F. ; AZEVEDO, L. ; KUMMERLE, A. ; Guedes, I.A. ; Dardenne, L.E. ; GONTIJO, V. ; TAROZZI, A. ; VIEGAS JR, C.

MOLECULES

<https://doi.org/10.3390/molecules25143165>

**4- “Cinnamoyl-N-Acylhydrazone-Donepezil Hybrids: Synthesis and Evaluation of Novel Multifunctional Ligands Against Neurodegenerative Diseases”**

Cindy Juliet Cristancho Ortiz, Caio Miranda Damasio, LetiziaPrucoli, Nathália Fonseca Nadur, Luciana Luiza de Azevedo, Isabella Alvim Guedes, Laurent Emmanuel Dardenne, Arthur Eugen Kümmerle, Andrea Tarozzi, Claudio Viegas  
Neurochemical Research

<https://doi.org/10.1007/s11064-020-03148-2>

**5- “MHOLline 2.0: Workflow for automatic large-scale modeling and analysis of proteins”**

Artur Duque Rossi, Pedro Henrique Eveling Oliveira, Dimitri Guglinski Siqueira, Victor Crisóstomo Cruz Reis, Laurent Emmanuel Dardenne, Priscila Vanessa Zabala CaprilesGoliatt

Revista Mundi Engenharia, Tecnologia e Gestão (ISSN: 2525-4782)

<http://dx.doi.org/10.21575/25254782rmetg2020vol5n61325>

**6- “Isobenzofuran-1(3H)-ones as New Tyrosinase Inhibitors: Biological Activity and Interaction Studies by Molecular Docking and NMR”**

Diego A Pires; Isabella A Guedes; Wagner L Pereira; Robson R Teixeira; Laurent E Dardenne; Claudia J Nascimento; José Daniel Figueroa-Villar  
Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Proteins and Proteomics

<https://doi.org/10.1016/j.bbapap.2020.140580>

***Preprints Publicados***

**7-“Drug Design and Repurposing with DockThor-VS Web Server: Virtual Screening focusing on SARS-CoV-2 Therapeutic Targets and their Non-Synonym Variants”**

Isabella A Guedes, Leon SC Costa, Karina B dos Santos, Ana LM Karl, Gregório K Rocha, Iury M Teixeira, Marcelo M Galheigo, Vivian Medeiros, Eduardo Krempser, Fábio L Custódio, Helio JC Barbosa, Marisa F Nicolás, Laurent E Dardenne

Preprint publicado na Research Square

<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-96789/v1>

(Artigo submetido para ScientificReports)

**4.4 - Participação em Eventos Científicos**

SNCT 2020

#### 4.5- Palestras à Convite

***“DockThorVS: Uma Plataforma Computacional para Triagem Virtual em Larga Escala Visando Alvos Moleculares de SARS CoV 2 e suas Variantes Genômicas”***

Palestrante: Laurent Dardenne

Palestra no ciclo de seminários LNCC 40 Anos

***“Desenvolvimento da Plataforma DockThorVS: Inteligência Artificial na Busca de Novos Fármacos Contra COVID 19”***

*Palestrante: Laurent Dardenne*

Palestra na SNCT 2020

***“Biologia, computação científica e inteligência artificial”***

Palestrantes: Fábio Lima Custódio e Isabella Alvim Guedes

Palestra na SNCT 2020

***Mini-Curso- Desenho de Fármacos e Estrutura de Proteínas***

Palestrantes: Karina Baptista, Ana Luiza Martins Karl e Mathes Muller (mestrandos, doutorandos e pós-docs membros do GMMSB)

Palestra na SNCT 2020

#### 4.6 Desenvolvimento de Programas e Produtos

***Programa DockTDeep***

Um programa de computador, denominado de DockTDeep, foi desenvolvido com o objetivo de auxiliar o desenvolvimento e a aplicação de Funções Scoring, para predição de afinidade Receptor-Ligante, baseadas em técnicas aprendizado profundo (DL, do inglês deep learning). O programa é capaz de gerar diferentes representações moleculares de complexos proteína-ligante, baseadas em grades multidimensionais de voxels (tensores 4D). Outra função crucial do programa é possibilitar o gerenciamento de grandes conjuntos de dados de complexos proteína-ligante, de maneira adequada para o treinamento com algoritmos de DL.

**Autores:** Matheus Muller, Lincon Vidal, Camila Silva de Magalhães, Isabella Alvim Guedes, Fábio Custódio, Laurent Emmanuel Dardenne

Ainda sem registro.

#### 4.7 Dissertações e Teses Defendidas

Dissertação de mestrado

Título “Desenvolvimento de Funções Empíricas Quântico-Clássicas para a Predição da Afinidade Proteína-Ligante”

Autor: Nicolau Gonçalves Borsato

Orientador principal: Laurent Emmanuel Dardenne

Co-orientadora: Isabella Alvim Guedes

Dissertação de mestrado

Título “DockTDeep: Um Programa para Desenvolvimento de Funções Scoring para Triagem Virtual de Compostos usando Redes Neurais Profundas”

Autor: Matheus Müller Pereira da Silva

Orientador principal: Laurent Emmanuel Dardenne

## **5 Atividades Projetadas para 2021**

Organização da X EMMSB (X Escola de Modelagem Molecular em Sistemas Biológicos) – 24 a 28 de maio de 2021 (evento a ser organizado de forma virtual).

## **6 Outras atividades relevantes**

Atividades como Vice-Coordenador da COMOD

O prof. Laurent faz parte da Comissão Deliberativa (representando o LNCC) na pós-graduação interinstitucional em Nanobiosistemas envolvendo as seguintes instituições (LNCC, UFRJ, FIOCRUZ-Biomanguinhos, INMETRO). Esta pós-graduação teve o seu primeiro processo seletivo realizado no primeiro semestre de 2019. Foram selecionados 2 alunos de mestrado e 7 de doutorado.



# BAMC

BIOLOGIA APLICADA À MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL



***Maurício Vieira Kritz***

RESPONSÁVEL



## RESUMO

Se considerarmos fenômenos como um conjunto de coisas que interagem e assim se modificam, há pelo menos duas diferenças fundamentais entre os fenômenos físicos ou químicos e os biológicos e complexos. Primeiro, nos fenômenos físicos e químicos as possibilidades de interação entre os componentes jamais variam com o desenrolar do fenômeno, enquanto que nos biológicos as possibilidades de interação entre os elementos do conjunto variam a cada instante. Segundo, os fenômenos biológicos são intrinsecamente multi-escala e as escalas não podem ser estudadas separadamente como na maioria dos fenômenos físicos e químicos, tendo em vista que fenômenos de uma escala podem ser componentes de outra. Nosso intuito é criar e desenvolver conceitos, objetos e espaços tanto matemáticos como computacionais que sejam melhor adaptados à descrição dos fenômenos da vida, e dos fenômenos complexos em geral. Para isto nos baseamos no aprendizado obtido no próprio exercício de modelar de forma matemática e/ou computacional estes fenômenos, com especial ênfase nos biológicos e ecológicos, bem como em fenômenos associados à difusão do conhecimento.

## **1 Grupo de Pesquisa**

### **1.1 Equipe**

#### **1.1.1 Pesquisadores**

- Maurício Vieira Kritz, COMOD
- Marcelo Trindade dos Santos, COMOD
- Marisa Fabiana Nicolás, COMOD

#### **1.1.2 Alunos e pós-Doutores**

- Pos-Doutores:
  - Maiana de Oliveira Cerqueira e Costa, PCI/LNCC, Brasil
  - Lucas dos Anjos, PCI/LNCC, Brasil
- Doutorandos:
  - Thiago Franco Leal, PPGEM/UERJ, Brasil
  - Gilberto Pereira Fernandes, Doutorado Multi-institucional em Modelagem de Difusão do Conhecimento, Brasil
- Mestrandos:
  - Ziting Liu, Universidade de Manchester, UK
- IC:
  - Priscila Luana Lopes de Barros Weisz, UENF, Brasil

#### **1.1.3 Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:
  - Carlos Antônio de Moura, IME/UERJ, Brasil
  - Célia Martins Cortez Silva, IME/UERJ, Brasil
  - Dilson Silva, IME/UERJ, Brasil
  - Roseli Wedermann, IME/UERJ, Brasil
  - Fabrício Alves Barbosa da Silva, PROCC/FIOCRUZ, Brasil
  - Andrea Henriques Pons, FIOCRUZ, Brasil
  - Alessandra Jordano Conforte, FIOCRUZ, Brasil

- Anna Cristina Calçada Carvalho, FIOCRUZ, Brasil
- Marcelo Alves Pinto, FIOCRUZ, Brasil
- Alberto Martín Rivera Dávila, FIOCRUZ, Brasil
- Ana Paula D’Alincourt Carvalho Assef, LAPIH/IOC/FIOCRUZ, Brasil
- Floriano Paes Silva Júnior, LABECFAR/IOC/FIOCRUZ, Brasil
- Claudete Fernandes de Queiroz, ICICT/FIOCRUZ, Brasil
- Helder Takashi Imoto Nakaya, Universidade de São Paulo, Brasil
- Alba Cristina Magalhães Alves de Melo, Universidade de Brasília, Brasil
- Maria Emilia Machado Telles Walter, UERJ, Brasil
- Maria Clécia Stelling de Castro, IME/UERJ, Brasil
- Internacionais:
  - Andreas Prokop, FBMH/Universidade de Manchester, UK
  - Daniela Delneri, FBMH/Universidade de Manchester, UK
  - Giles Nicholas Johnson, FBMH/Universidade de Manchester, UK
  - Jean-Marc Schwartz, FBMH/Universidade de Manchester, UK
  - Rasmus Petersen, FBMH/Universidade de Manchester, UK
  - Richard Preziosi, Universidade Metropolitana de Manchester, UK
  - David L. Robertson, Universidade de Glasgow, UK
  - Craig C. Douglas, Universidade de Wyoming, USA
  - Robert A. Lodder, Universidade de Kentucky, USA
  - Adriano Barbosa, Queen Mary University of London, UK
  - Enrique Zuazua, Universidade de Deusto, ES

## 1.2 Pesquisa e Desenvolvimento

- Tema 1: Matemática Biológica/Biologia Matemática Desenvolvimento de conceitos, objetos, espaços e arcabouços tanto matemáticos como computacionais que sejam bem adaptados à descrição dos fenômenos da vida e dos fenômenos complexos em geral. No momento nosso “estudo de caso” mais importante é o projeto Infecção por Vírus.
- Tema 2: Modelagem computacional de sistemas biológicos Tem por base a observação e representação de fenômenos e entidades biológicas de forma matemática e/ou computacional. Alguns tópicos em pauta no momento são: *redes bioquímicas, sistemas ecológicos e formação de biofilmes.*
- Tema 3: Modelagem da difusão do conhecimento Parte do convênio que constitui o Doutorado Multi-institucional e Multidisciplinar em Difusão do Conhecimento. Também neste caso trata-se de modelagem matemático-computacional.

### 1.3 Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação
  - Técnicas de modelagem, GA-046, LNCC
  - Modelagem da difusão do conhecimento, LNCC/UFBA/IFBA/SENAI-CIMATEC/UEFS/UNEB
  
- Orientações em andamento:
  - Thiago Franco Leal, PPGEM/UERJ, Brasil
  - Gilberto Pereira Fernandes, DMMDC/UFBA, Brasil
  
- Mini-cursos / Escolas / Congressos
  - Organização de Congressos:

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1 Análise dos principais determinantes de formação de biofilme através da modelagem computacional da *Pseudomonas aeruginosa* multirresistente produtora de SPM-1 (ST277)

Estudo pós-genômico das redes regulatórias do organismo multi-resistente a drogas *Pseudomonas aeruginosa*. Colaboração entre membros do LNCC, FioCruz e UERJ.

Coordenação: Fabrício Alves Barbosa da Silva, PROCC/FIOCRUZ

Vigência: de 02/2019 a 01/2021.

Valor Total: R\$ 99.120,00

### 2.2 Estudo das bases moleculares das comorbidades associadas ao desenvolvimento de COVID-19 grave — Uma abordagem de biologia de sistemas

Modelagem computacional das correlações moleculares da infecção pelo SARS-CoV-2 com as comorbidades associadas à gravidade da COVID-19 e seus tratamentos, através de aprendizado de máquina e da análise de redes biológicas. Colaboração entre membros do LNCC, USP, FioCruz, UERJ, UNB e QMUL.

Coordenação: Fabrício Alves Barbosa da Silva, PROCC/FIOCRUZ

Vigência: de 09/2020 a 01/2021.

Valor Total: R\$ 213.542,00

### 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

#### 3.1 Revitalização da Pesquisa: Infecção (Celular) por Vírus

Esta pesquisa visa descrever a infecção celular por vírus como uma interação entre organizações e informação e entender as diferentes reações celulares aos vírus. Iniciada em 2014 durante estadias em Manchester, ela encontrava-se engavetada desde 2017, devido a falta de insumo intelectual e interação com pesquisadores da área. A inundação de informações propiciada pelas investigações acerca da COVID-19 permitiu a retomada de nossas discussões e interações, mesmo remotas, visto estarmos todos estimulados por perguntas e problemas assemelhados. Um resultado preliminar é uma versão inicial de uma *Virus Scale-line* baseada na complexidade das organizações envolvidas e nos 19 sistemas críticos de J.G. Miller

#### 3.2 Revitalização da Pesquisa sobre Filopodia

O trabalho de devolvido pelo aluno Thiago Franco Leal, co-orientado por nós, C.A. de Moura (UERJ) e A. Prokop (UoM), está em fase de finalização e tem dado resultados espantosos. Além de suplantando os modelos computacionais para filopodia em 40 vezes, isto por restrições no recursos computacionais disponíveis, abre várias avenidas novas de trabalho neste domínio. Esta pesquisa ganhará novo ímpeto a partir de agora.

#### 3.3 Publicação em periódico Qualis A1

O prof. Marcelo Trindade publicou como co-autor o artigo "Characterization of a SPM-1 metallo-beta-lactamase-producing *Pseudomonas aeruginosa* by comparative genomics and phenotypic analysis" no periódico Scientific Reports (Nature Publishing Group), classificado na CAPES como Qualis A1.

#### 3.4 Bases moleculares da COVID-19 grave

O prof. Marcelo Trindade passou a colaborar com o projeto *Estudo das bases moleculares das comorbidades associadas ao desenvolvimento de COVID-19 grave: Uma abordagem de biologia de sistemas*, que foi recentemente aprovado para utilizar o Supercomputador Santos Dumont, e já utiliza a plataforma de HPC da Queen Mary University of London.

### 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

#### 4.1 Artigos Científicos em Periódicos

- do Nascimento, Ana Paula Barbosa ; MEDEIROS FILHO, FERNANDO ; PAUER, HEIDI ; ANTUNES, LUIS CAETANOMARTHA ; SOUSA, HÉRIO ; SENGGER, HERMES ; Albano, Rodolpho Mattos ; **Trindade dos Santos, Marcelo** ; CARVALHO-ASSEF, ANA PAULA D'ALINCOURT ; DA SILVA, FABRÍCIO ALVES BARBOSA. Characterization of a SPM-1 metallo-beta-lactamase-producing Pseudo- monas aeruginosa by comparative genomics and phenotypic analysis. Scientific Reports, v. 10,p. 13192, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-69944-6>

## 4.2 Livros e Capítulos de Livros

- F. A. Barbosa da Silva, N. Carels, M. Trindade dos Santos, F. J. P. Lopes, eds., *Networks in Systems Biology: Applications for Disease Modeling*, Computational Biology, v. 32, Springer/ISCB, 2020. ISBN 978-3-030-51861-5, <https://doi.org/10.1007/978-3-030-51862-2>
- Nicolás, M. F.; Cerqueira e Costa, M. de O. ; Ramos, P. I. P. ; dos Santos, M. T.; Perez-Rueda, E. ; Marti, M. A. ; do Porto, D. F. ; Turjanski, A. G., *Integrating Omics-Data to Prioritize Target Genes in Pathogenic Bacteria*. Computational Biology. 1ed. Cham, Switzerland: Springer International Publishing, 2020, v. 1, p. 217-276.

## 4.3 Artigos em Anais de Eventos

- *De La Modélisation à la Créativité Mathématique* In J.-Y. Béziau and D. Schulthess, editors. *L'Imagination*. Actes du 37e Congrès de l'ASPLF (Rio de Janeiro, 26-31 mars 2018), vol. 1 of Academia Brasileira de Filosofia, pages 267–289, Londres, 2020. ASPLF/College Publications. ISBN 978-1-84890-337-1

## 4.4 Palestras à Convite

- M.V. Kritz – *Problemas Complexos e o LNCC*, Seminários LNCC 40 Anos, 28/09/2020

## 5 Atividades Projetadas para 2020

Para o ano de 2021, pretendemos dar continuidade aos projetos em andamento aqui descritos, bem como às orientações e colaborações em curso. Com a reativação/impulsão de duas áreas de trabalho, as possibilidades se multiplicam. Podemos ressaltar a elaboração de artigos científicos em três direções: a do projeto sobre as bases moleculares das comorbidades associadas a formas graves de COVID-19, pelo menos dois sobre aspectos da modelagem de filopodia, e um “white paper” sobre a infecção viral.

## 6 Outras Informações Relevantes

A economia de tempo de deslocamento foi, certamente, um bônus do distanciamento social necessário ao controle da pandemia; assim como o rápido desenvolvimento de aplicativos para reuniões, aulas e discussões remotas, síncronas ou não. Havendo, além do mais, a possibilidade de gravarmos as conversas de trabalho, sempre que isto se mostrar útil. Estes aplicativos tornaram também possível assistirmos e participarmos de evento que, em condições normais não poderíamos.

Todavia, nem tudo tem sido flores. Houve sobrecarga de apresentações nos congressos de participamos, atividades sempre muito longas e nenhum tempo ou espaço para diálogo direto. É sobretudo difícil travar novos contatos e estabelecer novas parcerias. Precisamos aprender a usar estas novas facilidades convenientemente e retomar os procedimentos tradicionais tão logo possível, mesclando-os com os novos.



# HeMoLab

LABORATÓRIO DE MODELAGEM EM HEMODINÂMICA



***Pablo Javier Blanco***

RESPONSÁVEL

## RESUMO

O HeMoLab realiza atividades de pesquisa e desenvolvimento no âmbito da computação científica aplicada à medicina. As atividades principais do grupo estão relacionadas com a modelagem e simulação de sistemas fisiológicos, com ênfase na modelagem do sistema cardiovascular humano e no estudo do desenvolvimento e progresso de doenças cardiovasculares. Especificamente, as atividades se centram no desenvolvimento de modelos para simular o escoamento sanguíneo, a interação fluid-estrutura, a propagação de ondas, para processar imagens médicas, e para simular fenômenos multiescala. De forma complementar, preza-se o desenvolvimento de programas de computador visando a realização de simulações em sistemas de computação de alto desempenho e visando a popularização e a contínua agregação dos modelos construídos dentro do grupo.

## 1. Grupo de Pesquisa

### 1.1. Equipe

#### 1.1.1. Pesquisadores

- Pablo Javier Blanco - COMAC

#### 1.1.2. Alunos e pós-Doutores

- Pós-Doutores: Luis Alonso Mansilla Alvarez (LNCC)
- Mestrandos: Luís Fernando Mendes Cury (LNCC), Jefferson da Silva Fernandes de Azevedo (LNCC)

#### 1.1.3. Pesquisadores Colaboradores

- Nacionais: Gustavo Carlos Buscaglia (USP), Mario Sansuke Maranhão Watanabe (UFRP), Pedro Alves Lemos Neto (USP, Hospital Albert Einstein), Maurício Younes Ibrahim (UERJ), Luciano Fernandes Gonçalves (UFRRJ)
- Internacionais: Gonzalo Daniel Maso Talou (University of Auckland, Nova Zelândia), Gonzalo Damián Ares (Universidad Nacional de Mar del Plata, Argentina), Carlos Alberto Bulant (Universidad Nacional del Centro, Argentina), Lucas Omar Müller (University of Trento, Itália), Santiago Adrián Urquiza (Universidad Nacional de Mar del Plata, Argentina), Pablo Javier Sánchez (Universidad Nacional del Litoral, Argentina), Eduardo Alberto de Souza Neto (Swansea University, Reino Unido), Alessandro Veneziani (Emory University, EUA), Soroush Safaei (University of Auckland, Nova Zelândia), Héctor Gardá-Gardá (Medstar, Washington, Estados Unidos).

## 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- *Acoplamento de modelos dimensionalmente heterogêneos*: Desenvolvimento de formulações variacionais consistentes para o acoplamento de modelos 3D, 2D, 1D e 0D na mecânica dos fluidos, na mecânica dos sólidos e em fenômenos de transporte. Desenvolvimento de técnicas iterativas eficientes para o acoplamento de modelos heterogêneos.
- *Modelagem e simulação do sistema cardiovascular humano*: Desenvolvimento de modelos fisiológicos para simular o comportamento do sistema arterial e venoso, e o acoplamento com a fisiologia cardíaca. Desenvolvimento de técnicas de assimilação de dados e integração com dados clínicos de pacientes específicos
- *Métodos numéricos para problemas de escoamento sanguíneo*: Desenvolvimento de técnicas numéricas para resolver de forma aproximada o escoamento sanguíneo utilizando descrições de natureza 1D e 3D de forma a simular a hemodinâmica em geometrias advindas de imagens médicas de pacientes específicos. Desenvolvimento de métodos paralelos para a resolução de problemas hemodinâmicos em larga escala usando computação distribuída.
- *Técnicas de processamento de imagens médicas*: Desenvolvimento de métodos de segmentação de imagens de tomografia computadorizada e de ultrassom intravascular por meio de técnicas de aprendizado de máquina com o objetivo de

acelerar o processamento e avaliação clínica das imagens e de construir modelos geométricos de pacientes específica.

- *Modelagem multi-escala*: Desenvolvimento de técnicas de modelagem para problemas com múltiplas escalas baseadas no conceito de elemento de volume representativo. Desenvolvimento de modelos multi-escala na mecânica dos sólidos, na mecânica dos fluidos, em problemas multi-física. Desenvolvimento de aplicações na modelagem de materiais biológicos, fenômenos de fratura de material e escoamentos em meios permeáveis.

### **1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos**

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação: Métodos Variacionais (LNCC), Cálculo Numérico, Módulo 1/3 (LNCC), Introdução à Modelagem de Sistemas Físicos (UCP)

## **2 Projetos de Pesquisa**

### **2.1. Medicina Assistida por Computação Científica**

- Título completo: Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Medicina Assistida por Computação Científica
- Responsabilidade: Vice-coordenador
- Vigência: 28/11/2016 - 28/11/2021
- Financiamento: CNPq/CAPES/FAPESP (465586/2014-7)
- Resumo: O objetivo do presente projeto é desenvolver e aplicar técnicas de computação científica na solução de problemas estratégicos na área da saúde no País, consolidando a área da Medicina Assistida por Computação Científica formando recursos humanos; e transferindo para a sociedade e setor produtivo os conhecimentos e benefícios inerentes.

### **2.2. Modelos do sistema cardiovascular para pacientes específicos**

- Título completo: Modelos computacionais do sistema cardiovascular humano individualizados a pacientes específicos.
- Responsabilidade: Coordenador
- Vigência: 18/02/2019 - 18/02/2022
- Financiamento: Universal CNPq (407751/2018-1)
- Resumo: O objetivo do presente projeto é o desenvolvimento de atividades de pesquisa e formação de recursos humanos visando a criação de estratégias numéricas e computacionais para construir modelos do sistema cardiovascular humano com orientação a pacientes específicos empregando técnicas de assimilação de dados e técnicas de otimização.

### **2.3. Modelos hemodinâmicos orientados a pacientes específicos**

- Título completo: Modelagem computacional do sistema cardiovascular humano orientada a pacientes específicos
- Responsabilidade: Coordenador
- Vigência: 01/03/2020 - 01/03/2023
- Financiamento: Produtividade em Pesquisa CNPq (304309/2019-2)
- Resumo: Neste projeto aborda-se a problemática de utilizar técnicas de assimilação de dados a fim de construir modelos computacionais do sistema cardiovascular humano individualizados a pacientes e/ou populações manifestando condições cardiovasculares específicas

## **3 Destaques Científicos e Tecnológicos**

### **3.1. Modelo do sistema cardiorespiratório com mecanismos de controle**

Desenvolvemos um modelo de parâmetros condensados do sistema cardiorespiratório possuindo como característica saliente as diferentes escalas presentes no problema: a pulsatilidade de escoamento sanguíneo, e as escalas de tempo associadas aos mecanismos de controle barorrefl e quimiorreflexo. O modelo inclui o transporte de gás oxigênio e carbônico, além de ser um modelo de laço fechado (acoplamento arterial-venoso). Controle hemodinâmico periférico de caráter local é também incorporado para simular cenários encontrados na redução local de sangue em territórios específicos. O modelo cardiorespiratório incorpora compartimentos para descrever os diversos componentes do sistema cardiovascular, assim como também os compartimentos onde ocorrem as trocas metabólicas, o sistema nervoso central, e os circuitos de retorno do controle. O sistema de controle inclui as vias barorreceptoras, as vias quimiorreceptoras periférica e central. Este modelo permite simular situações de hipóxia, hipercapnia e hemorragia. Os resultados obtidos estão de acordo com as medidas fisiológicas experimentais e teóricas. Este modelo constitui um modelo que integra múltiplos sistemas, e é a base para o desenvolvimento de modelos distribuídos do escoamento sanguíneo com transporte de espécies e mecanismos de controle. A Figura 1 mostra o modelo dos sistemas de controle atuando sobre o sistema cardiovascular e os resultados obtidos em termos de pressão arterial, conteúdo dos gases em sangue e sinais emitidos pelos mecanismos de controle em uma condição de repouso.

O modelo construído representa um passo fundamental para a construção de modelos integrativos do sistema cardiorespiratório com melhores capacidades preditivas e descritivas. Os mecanismos de controle e modelos metabólicos empregados neste trabalho planejam ser reutilizados na criação de modelos anatomicamente detalhados do sistema cardiorespiratório. Isto possibilitará o estudo de uma retroalimentação mais refinada, permitindo analisar a contribuição dos diferentes territórios no controle global do sistema, e melhorando as condições fisiológicas sob as quais os diversos órgãos encontram-se em funcionamento, tanto em condições normais como patológicas.

### 3.2. Comparação da hemodinâmica arterial empregando modelos detalhados e modelos simplificados

Nesta linha de trabalho procuramos avaliar o impacto da definição da anatomia vascular nas predições de modelos do escoamento sanguíneo na rede

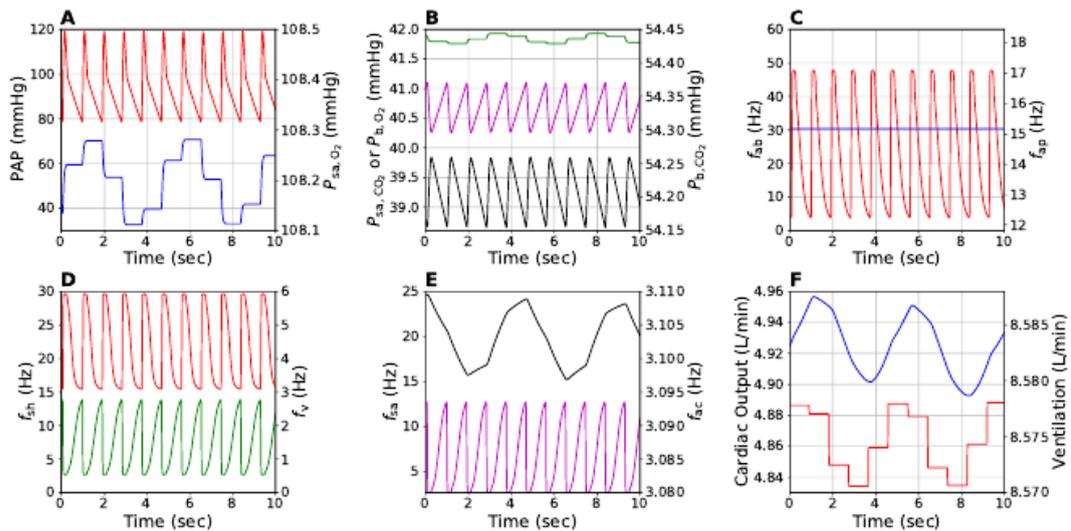
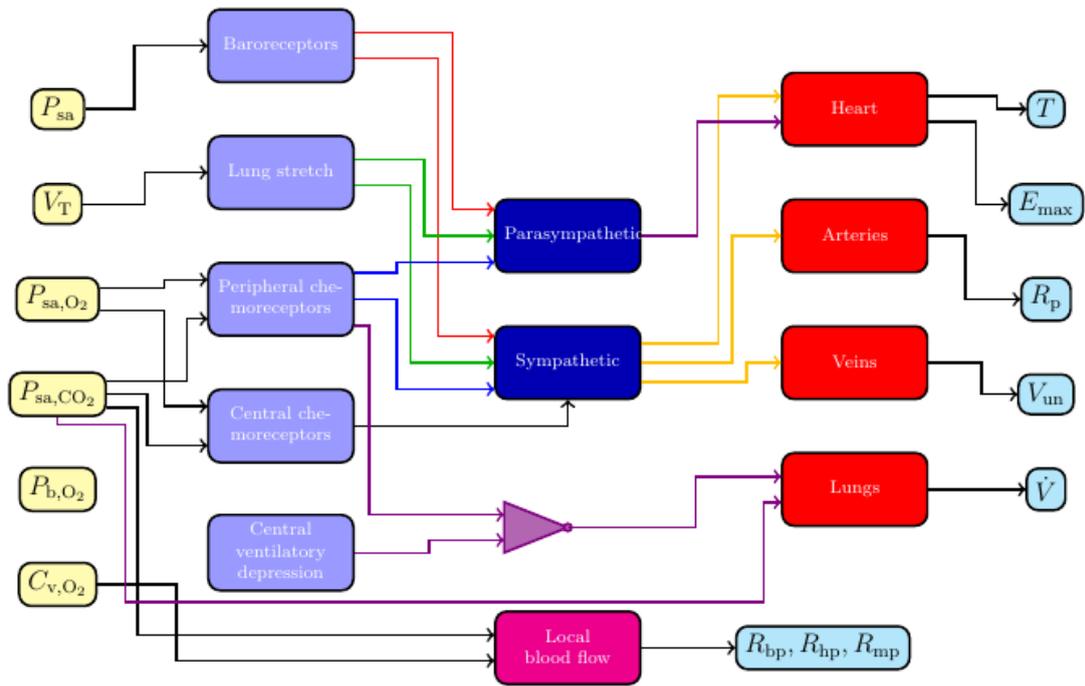


Figura 1: Acima: Relação entre variáveis controladas e sinais emitidos para produzir alterações no sistema cardiovascular. Abaixo: Sinais fisiológicos em estado de repouso.

arterial humana. Para isto, comparamos os resultados obtidos de simulações realizadas com o modelo anatomicamente detalhado ADAN desenvolvido no HeMoLab, com um modelo obtido a partir do ADAN, reduzindo o número de artérias até chegar a um modelo como os encontrados na literatura, o qual contém 86 vasos arteriais. Comparamos os resultados tanto qualitativa como quantitativamente tanto em termos de pressão como de vazão volumétrica, além de impedância e decomposição de ondas. As comparações foram realizadas em condições normais e também em condições alteradas por doenças típicas, tais como estenoses. Os resultados obtidos nos mostraram que os modelos simplificados e detalhados estão em acordo satisfatório quando o foco é o estudo da hemodinâmica nas artérias principais e em condições fisiológicas normais. Por sua vez, o modelo detalhado possui melhor capacidade de representar a hemodinâmica real nos vasos periféricos devido ao maior refinamento vascular nessas regiões. As discrepâncias entre os modelos são acentuadas de forma marcante no caso em que variações anatômicas ou alterações devido a doenças são introduzidas no sistema cardiovascular. Ou seja, a concordância entre os modelos se deteriora em situações de altíssimo interesse prático, como são as doenças. Isto nos permite estar em melhores condições para interpretar as capacidades dos diferentes modelos e as limitações dos modelos simplificados, os quais são amplamente empregados na literatura científica internacional.

### **3.3. Quantificação de incertezas em simulações do escoamento sanguíneo**

A aplicação das tecnologias de simulação na clínica apresenta vários obstáculos e desafios devido, principalmente, à falta de informações necessárias para que os modelos possam ser instanciados de forma específica. Estas informações são condições de contorno, parâmetros, e até a própria geometria vascular. Esses elementos, somados a problemas inerentes à aproximação numérica realizada, fazem com que as predições dos modelos discrepem da realidade, o que afeta a confiabilidade das simulações. Assim sendo, o desenvolvimento de técnicas para quantificar as incertezas dos modelos é fundamental. Na modelagem do sistema cardiovascular o desafio é ainda incrementado devido à complexidade da rede vascular, assim como à natureza tridimensional do escoamento sanguíneo. Nesta linha de trabalho, temos desenvolvido uma técnica eficiente para quantificação de incertezas em problemas de escoamento de fluidos em redes vasculares. A técnica se baseia na utilização do método denominado TEPEM (transversally enriched pipe-element method), desenvolvido no grupo HeMoLab, para a simulação com baixo custo de escoamentos incompressíveis em domínios tubulares. TEPEM pode ser visto como uma técnica de redução de dimensionalidade que mantém versatilidade para abordar problemas em geometrias específicas. Para a quantificação de incertezas, utilizamos uma técnica de decomposição de domínios denominada NetUQ na qual o problema de decomposição de domínios é formulado para acoplar as variáveis da expansão que representa o comportamento estocástico das quantidades de interesse. Em cada domínio, o problema local

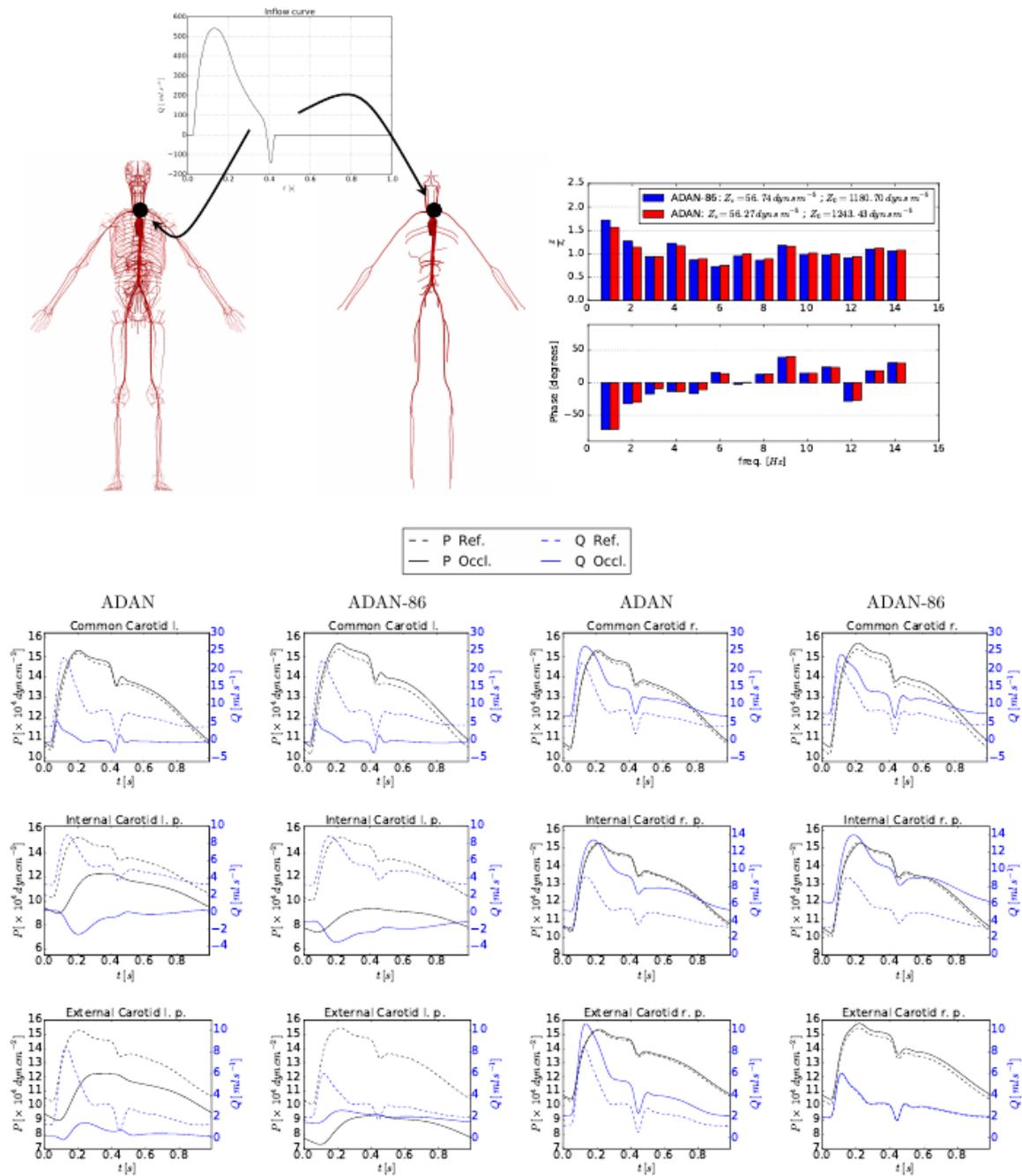


Figura 2: Acima esquerda: modelos utilizados no estudo comparativo. Acima direita: comparação da impedância na raiz da aorta. Abaixo: formas de onda da pressão (preto) e da vazão volumétrica (azul) em algumas artérias do modelo ADAN (colunas 1-3) e do ADAN-86 (colunas 2-4) no caso de oclusão da artéria carótida comum. As linhas pontilhadas representam o cenário de referência, e as linhas sólidas representam um cenário com o círculo de Willis incompleto (l.: esquerda, r.: direita, p.: proximal).

é aproximado utilizando TEPEM, e o problema global é escrito em termos de variáveis de interface relacionadas com a expansão de *polynomial chaos* que transporta a informação sobre as variáveis randômicas. A Figura 3 mostra os conceitos que foram empregados na criação da técnica.

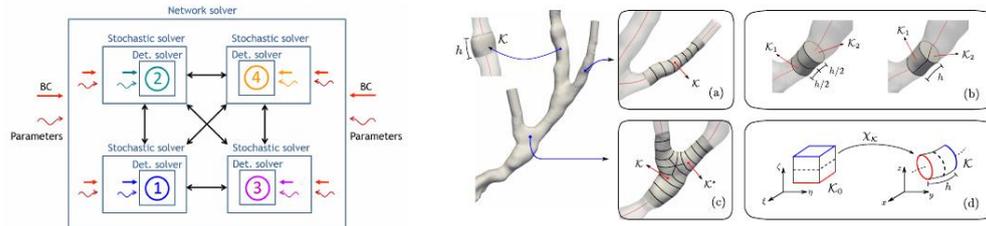


Figura 3: Direita: Conceito do NetUQ para decomposição do problema de quantificação de incertezas. Esquerda: Conceito do TEPEM para aproximar problemas com dinâmica longitudinal e transversal diferenciadas.

A integração TEPEM-NetUQ faz com que a abordagem seja escalável e possa ser empregada para estudar a incertezas em grandes redes de vasos. Na Figura 4 o método é utilizado para investigar o impacto das incertezas na definição das condições de contorno em duas geometrias. A geometria da esquerda é obtida da rede vascular cerebral do modelo ADAN, enquanto que a geometria da direita provém de uma tomografia computadorizada de um paciente específico. Na mesma figura, mostram-se os valores médios e desvio padrão, assim como o coeficiente de variação associado à pressão e à tensão de cisalhamento sobre a parede das artérias.

### 3.4. Segmentação automática de imagens de ultrassom intravascular

A avaliação da área luminal mínima (MLA) em imagens de ultrassom intravascular (IVUS) é atualmente realizada por inspeção visual, o que leva a uma grande variabilidade na seleção da imagem que caracteriza a MLA assim como também MLA na definição do contorno entre o lumen e a parede arterial. Além disso, este é um processo que demanda muito tempo e profissionais adequadamente treinados. Nesta linha de pesquisa temos desenvolvido um processamento completamente automático para a segmentação do contorno do lumen em imagens de IVUS.

A metodologia está composta por três etapas. Primeiro, um procedimento de gating automático é realizado para extrair um sinal de movimento das imagens e selecionar o conjunto de imagens correspondentes à fase cardíaca da diástole. Segundo, um método de aprendizado de máquina profundo composto por uma rede neuronal convolucional é treinado e validado a fim de ter uma primeira segmentação do lumen em coordenadas polares. Esta rede possui a característica saliente de ser alimentada por múltiplas imagens adjacentes, fornecendo maior coerência longitudinal no resultado da segmentação. Por último, um algoritmo de regressão baseado no conceito de processos Gaussianos é utilizado para remover ruído de alta frequência das segmentações e prover consistência à segmentação no sistema Cartesiano.

Para treinar, validar e testar a rede, empregamos 85 datasets de imagens de IVUS (52 pacientes). Do total, 736 imagens foram empregadas para testar as predições da rede treinada. As comparações incluíram erro médio na definição do lumen, erro médio no cálculo da Jaccard (mede superposição).

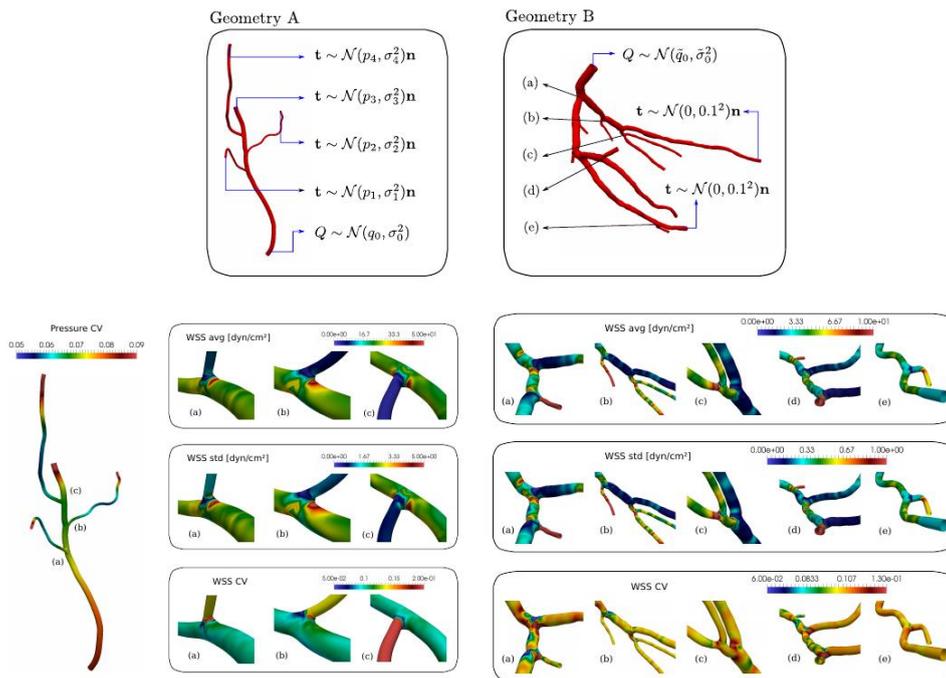


Figura 4: Acima: Definição das incertezas nos modelos vasculares do cérebro (esquerda) e do coração (direita). Abaixo: valores médios, desvio padrão e coeficiente de variação para a pressão e para a tensão de cisalhamento em ambas as geometrias vasculares.

A Figura 5 apresenta a metodologia proposta para a segmentação do lumen em imagens de IVUS. Primeiro, a partir do volume de IVUS é extraída um sinal que combina sinais presentes na imagem para selecionar de forma automática as imagens que correspondem à diástole. Com essas imagens, constrói-se o volume registrado que é utilizado no processo de segmentação. Grupos de imagens adjacentes são fornecidas à rede neuronal, a qual entrega a segmentação inicial do lumen da imagem central do grupo. Um processo Gaussiano é empregado para remover flutuações de alta frequência e fazer com que a segmentação seja periódica no plano de coordenadas polares. Finalmente, a malha é o resultado da concatenação dos diferentes contornos do lumen segmentados.

A Figura 6 apresenta o erro na segmentação do método comparando contra a segmentação manual realizada por um especialista. Na parte superior se vê a segmentação em coordenadas polares e a definição das métricas utilizadas. Abaixo, apresentam-se os gráficos mostrando a distribuição da métrica para cada cenário proposto empregando uma quantidade diferente de vizinhos. As barras horizontais denotam resultados cujas diferenças são estatisticamente significativas.

Estes resultados demonstram que a abordagem proposta é eficiente e adequada para realizar uma segmentação automática do lumen em imagens de IVUS, reduzindo o custo em termos de recursos humanos e tempo empregado na demarcação manual dessas imagens.

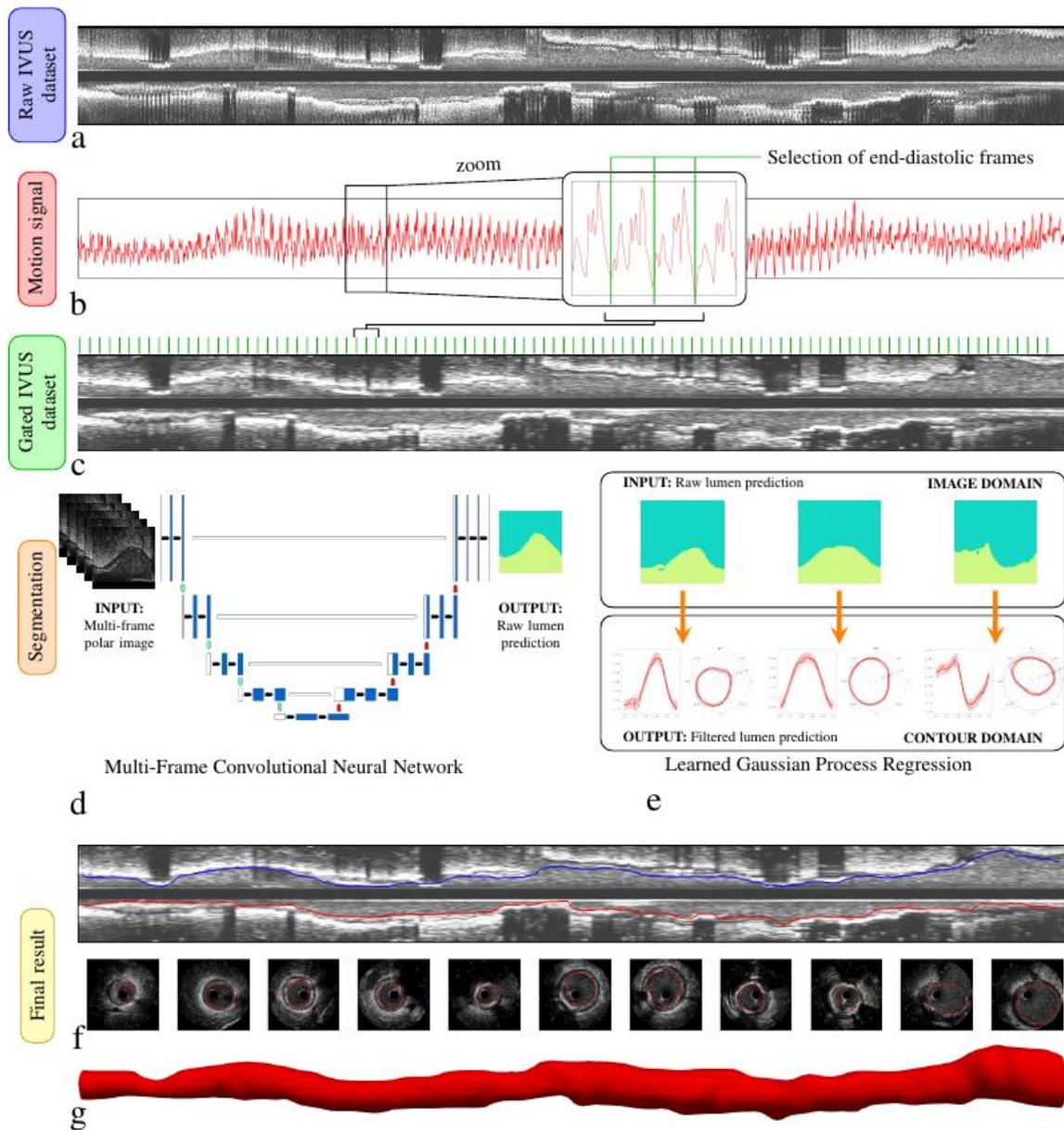


Figura 5: Processamento de imagens, iniciando com a imagem original, passando pelo processo de gating e a segmentação via uma rede convolucional U-NET. Um processo Gaussiano é incorporado para dar consistência final à segmentação.

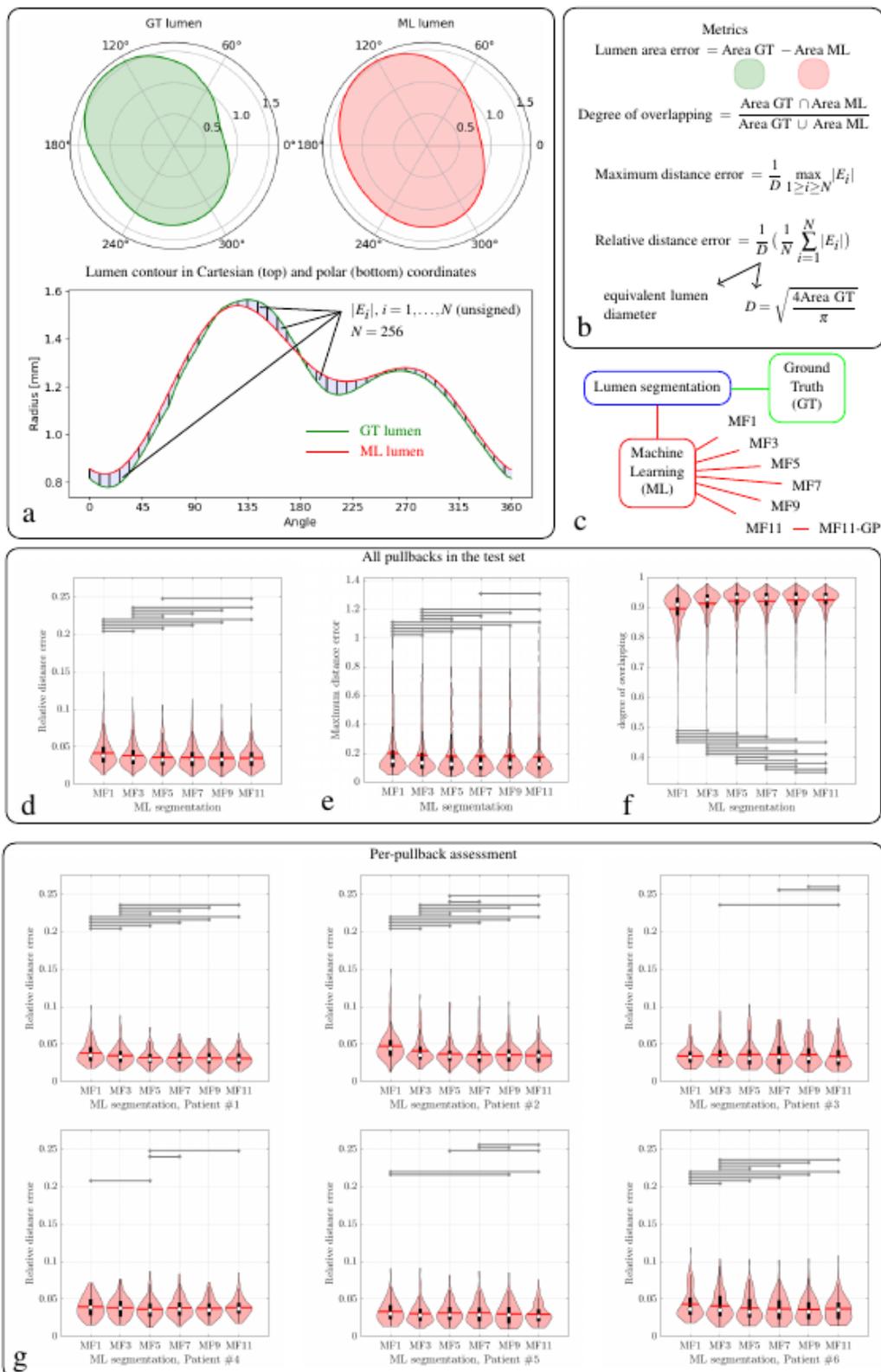


Figura 6: Métricas de desempenho para avaliar a segmentação automática.

## 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- Fernandes, LG; Trenhago, PR; Feijóo, RA; Blanco, PJ. Integrated cardiorespiratory system model with short timescale control mechanisms. *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, early view, 2020.
- Ziemer, PGP; Bulant, CA; Orlando, JI; Maso Talou, GD; Álvarez, LAM; Guedes Bezerra, C; Lemos, PA; García-García, HM; Blanco, PJ. Automated lumen segmentation using multi-frame convolutional neural networks in Intravascular Ultrasound datasets. *European Heart Journal Digital Health*, v. 1, p. 75-82, 2020.
- Su, S; Blanco, PJ; Müller, LO; Hunter, PJ; Safaei, S. Bond graph model of cerebral circulation: toward clinically feasible systemic blood flow simulations. *Physiome Journal*, v. 1, p. 12859424, 2020.
- Blanco, PJ; Müller, LO; Watanabe, SM; Feijóo, RA. On the anatomical definition of arterial networks in blood flow simulations: comparison of detailed and simplified models. *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology*, v. 19, p. 1663-1678, 2020.
- Guzzetti, S; Mansilla Alvarez, LA; Blanco, PJ; Carlberg, KT; Veneziani, A. Propagating uncertainties in large-scale hemodynamics models via network uncertainty quantification and reduced-order modeling. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 358, p. 112626, 2020.

### 4.2. Livros e Capítulos de Livros

- Edgardo O. Taroco, Pablo J. Blanco, Raúl A. Feijóo. *Introduction to the Variational Formulation in Mechanics: Fundamentals and Applications*, ISBN 978-1119600909, Wiley, 2020

### 4.3. Artigos em Anais de Eventos

- Santos, IMF, Giralardi, GA; Blanco, PJ; Loula, AD. Parameterizing Variational Methods Through Data-Driven Inverse Problems for Image Processing Applications. *International Conference on Systems, Signals and Image Processing*, Niterói, 2020.
- Gutierrez, J; Blanco, PJ; Spence, JD. Deep and superficial brain arteries flow pattern suggest differential risks to systemic hemodynamics. *International Stroke Conference*, Los Angeles, 2020.
- Blanco, PJ; Müller, LO. Exploration of Kalman filtering for parameter identification in cardiovascular simulations. *International Conference on the Virtual Physiological Human*, Paris, 2020.
- Cury, LFM; Guimarães, CSBR; Younes-Ibrahim, M; Blanco, PJ. Modelagem da vascularização arterial do rim humano. *XIII Encontro Acadêmico de Modelagem Computacional*, Petrópolis, 2020.

- Guimarães, CSBR; Cury, LFM; Younes-Ibrahim, M; Blanco, PJ. Vascularização Automática do Rim Humano. XXX Congresso Brasileiro de Nefrologia, Evento Online, 2020.

#### 4.4. Participação em Eventos Científicos

- VPH2020, The International Conference on the Virtual Physiological Human, realizado virtualmente em Junho de 2020.
- WCCM2020, World Conference in Computational Mechanics, a ser realizado virtualmente em Janeiro de 2021.

#### 4.5. Palestras à Convite

- Pablo Javier Blanco. Conferencista semi-plenário no World Conference in Computational Mechanics (WCCM 2020) a ser realizado virtualmente em Janeiro de 2021. Título da palestra: *Exploration of Kalman filtering for parameter identification in cardiovascular simulations.*
- Pablo Javier Blanco. Conferencista keynote no International Conference on the Virtual Physiological Human (VPH 2020) realizado virtualmente em Junho de 2020. Título da palestra: *Computational Hemodynamics across the Scales. From Fundamentals to Applications.*
- Paulo G.P. Ziemer. Palestrante na Semana Nacional de Ciência e Tecnologia 2020. Título da palestra: *Segmentação automática de imagens médicas de ultrassom intravascular via técnicas de aprendizagem de máquina.*

#### 4.6. Desenvolvimento de Programas e Produtos

- LIVCor v. 1.0: Software (não registrado) para segmentação de imagens de ultrassom intravascular
- HeMoLabCor v. 1.0: Software (não registrado) para simulação do escoamento sanguíneo em artérias coronárias de pacientes específicos
- HeMoLab1D v. 1.0: Software (não registrado) para simulação do sistema cardiovascular humano

#### 4.7. Dissertações e Teses Defendidas

Não houve

#### 4.8. Participação como Membro em Comissões Nacionais/Internacionais ou Corpo Editorial

- Pablo Javier Blanco. Editor Associado do periódico *International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering*, Wiley.

- Pablo Javier Blanco. Membro do Corpo Editorial do periódico *Engineering Computations*, Emerald.

#### **4.9. Prêmios e Honrarias**

- Pablo Javier Blanco. Aprovação de bolsa em Produtividade do CNPq nível 1C. Período 2020-2023.

### **5 Atividades Projetadas para 2021**

- Continuar a desenvolver técnicas de processamento de imagens de ultrassom intravascular por meio de técnicas de aprendizado de máquina
- Continuar a desenvolver técnicas de processamento de imagens de tomografia computadorizada por meio de técnicas de aprendizado de máquina
- Continuar a desenvolver técnicas numéricas eficientes para simular escoamentos em tubos com ênfase em problemas de interação fluido-estrutura
- Continuar a desenvolver técnicas de identificação de parâmetros em modelos hemodinâmicos
- Continuar a desenvolver o modelo ADAVN (sistema arterial-venoso acoplado)
- Continuar a desenvolver modelos vasculares da microcirculação do sangue em órgãos específicos
- Continuar a desenvolver técnicas de diagnóstico médico por simulação computacional
- Continuar a orientar alunos de mestrado e iniciação científica
- Realizar visita técnica à University of Trento, na Itália
- Realizar visita técnica à Universidade Nacional de Mar del Plata, na Argentina

### **6 Outras Informações Relevantes**

- Participação na Semana Nacional de Ciência e Tecnologia através de uma mesa redonda discutindo os desafios do núcleo de inteligência artificial do LNCC.



# TMG

MODELAGEM DO CRESCIMENTO TUMORAL



**Regina C. Almeida**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O objetivo principal do Grupo de Pesquisa em Modelagem de Tumoral é desenvolver modelos matemáticos e computacionais preditivos para iniciação, crescimento e declínio de tumores em resposta às diversas modalidades de tratamento. Usando uma estrutura teórica baseada em princípios biológicos e físicos, os “hallmarks” do câncer e dados empíricos, integramos uma variedade de componentes da ciência preditiva que permitem lidar com a seleção, calibração e validação de modelos na presença de incertezas. Desenvolvemos classes de modelos híbridos e métodos numéricos que são empregados para representar eventos nos níveis molecular, celular e tecidual. Nossa hipótese central é que as novas metodologias desenvolvidas pela equipe possam fornecer uma abordagem valiosa às terapias contra o câncer, contribuindo para reduzir significativamente as mortes. A pesquisa resulta de esforços interdisciplinares em diferentes áreas, incluindo conhecimentos essenciais de matemática aplicada, métodos numéricos e computacionais, e biologia teórica do câncer.

## 1 Grupo de Pesquisa

Informações detalhadas estão disponíveis em

(<http://www.tmg.lncc.br>)



### 1.1. Equipe

#### 1.1.1. Pesquisadores

- Regina C. Almeida, COMOD
- Renato S. Silva, COMOD
- Sandra Mara C. Malta, COMAC
- Michel Iskin, COMAC (aposentado)

#### 1.1.2. Alunos (LNCC) e pós-Doutores

##### Doutorandos (mês/ano de início no PPG/LNCC)

- Anna Claudia M. Resende (mar/2016; coorientação de Ernesto Lima)  
-defesa: 21/12/2020
- Emanuelle A. Paixão (mar/2019; coorientação de Luciana Barros)
- Gustavo T. Naosuka (mar/2018; coorientação de Heber Rocha)

##### Mestrandos (mês/ano de início no PPG/LNCC)

- João Vitor de O. Silva (set/2018; coorientação de Renato Silva)
- Laura Costa P. Miranda (mar/2020; coorientação de Sandra Malta)

##### Pós-Doutores

- Lucas dos Anjos (nov/2019, PCI)  
Projeto: Controle biológico realizado por um agente especialista exótico e um generalista nativo envolvido sem predação intraguilida  
Co-supervisão: Michel Iskin

- Gustavo Libotte (jul/2020, PCI)  
Projeto: Modelagem Matemática e Computacional para Simulação da Dinâmica da COVID-19: Desenvolvimento de Técnicas para Mitigação da Doença em Localidades Brasileiras  
Co-supervisão: Sandra Mara C. Malta

### 1.1.3. Pesquisadores Colaboradores

#### Nacionais

- Luciana R. C. Barros, Instituto do Câncer do Estado de São Paulo-ICESP/USP
- Rafael Bonfim, Universidade Federal de Juiz de Fora
- Artur Fassoni, Universidade Federal de Itajubá
- Andrea Valli, Universidade Federal do Espírito Santo
- (FEM) Isaac Santos e Lucia Catabriga, UFES

**Internacionais** (Oden Institute for Computational Engineering and Sciences, The University of Texas at Austin e University of Indiana at Bloomington)

- Ernesto Augusto B. F. Lima
- J. Tinsley Oden
- Thomas Yankeelov
- Heber Rocha

### 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- **Modelagem híbrida multiescala:** desenvolvimento de modelos para a representação de fenômenos que ocorrem a nível intracelular, celular e de tecido, utilizando diferentes técnicas de modelagem( modelagem baseada em indivíduos, equações diferenciais ordinárias e parciais).
- **Métodos de calibração, validação e seleção de Modelos:** desenvolvimento de métodos para calibração, validação e seleção de modelos utilizando dados *in vitro* e de imagem.
- **Métodos numéricos:** desenvolvimento de métodos robustos para solução dos modelos de crescimento tumoral, incluindo quantificação de incertezas.
- **Identificação de sistemas dinâmicos não-lineares:** extração de equações governantes através de dados.
- **Ecologia Matemática:** desenvolvimento de modelos para a representação de dinâmica de populações
- **Epidemiologia Matemática:** desenvolvimento de modelos para a representação de dinâmica da COVID-19; meta populações.

### 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

#### Orientações finalizadas:

- Heber Rocha (12/12/2019)

Título: Continuous-Discrete Approach of Tumor Growth: Multiscale Modeling and Bayesian Inference using Gaussian Process Surrogates

- Anna Resende (21/12/2020)

Título: Toward Predictive Computational Models of Breast Cancer Development and Treatment

#### Organização de Eventos:

- VI Encontro de Modelagem Matemática e Computacional do Crescimento Tumoral-EM<sup>2</sup>C<sup>2</sup>T

Programa de Verão do LNCC, 04 a 06 de março de 2020. Organizadores:

RCCA, Luciana R. C. Barros (ICESP/USP), Paulo F.

A. Mancera (Unesp/Botucatu)

(<http://www.tmg.lncc.br/events.html>)

## 2 Projetos de Pesquisa

A pesquisa do TMG é totalmente financiada pelas bolsas de doutorado e mestrado.

## 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

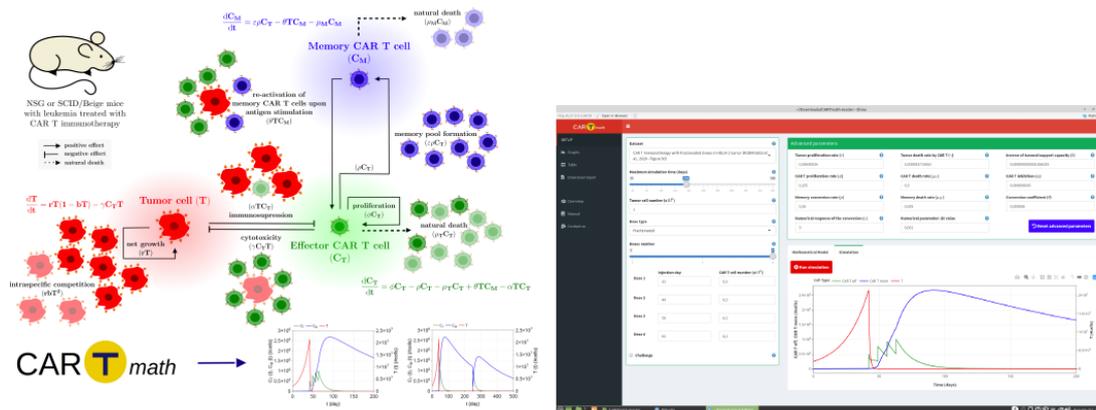
### Destaque 1

O aluno Heber L. Rocha, cuja tese foi defendida em 12/12/2019, iniciou em fevereiro de 2020 sua pesquisa de pós-doutorado no **MathCancer Lab** da University of Indiana at Bloomington, sob a supervisão do **Dr. Paul Macklin**.

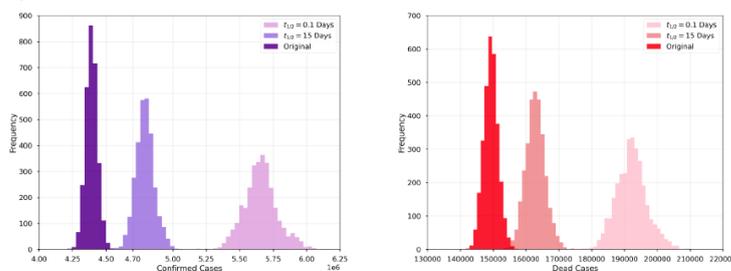
### Destaque 2

Elaboração e registro do CarTmath (Processo # 512020001606-5). Disponível at <https://github.com/tmglncc/CARTmath>

Autoria: Emanuelle A. Paixão, Andrea Valli, Gustavo Naosuka, Luciana R C Barros, R A



- **Covid-19:** Efeito da implementação e relaxamento do distanciamento social. Grupo de trabalho: Anna, João Vitor, Lucas, Sandra, Claudia (UFRRJ), Diego, Tadeu. Análise espacial: Gustavo Libotte (PCI), Haron, Klaus, Jesuliana, Laura,...



- Indicação da tese *Pest biological control in a spatial prey-predator system with Allee effect in the control agent population* para prêmio CAPES. Autoria: Lucas do Anjos sob orientação de Michel Iskin e RCCA.

## 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

- Luciana R. C. Barros, Brendon J. Rodrigues, R. C. ALMEIDA. **CAR-T cell Goes on a Mathematical Model.** Journal of Cellular Immunology, v.2, p.31-37, 2020.
- Anna C. M. Resende, Rafael A. Bonfim, Ernesto A. B. F. Lima, Gustavo T. Naosuka, Regina C. Almeida. **AnImage-driven, Mechanical Deformation Coupled Reaction-Diffusion Model for Describing Tumor Development.** REVISTA MUNDI ENGENHARIA, TECNOLOGIA E GESTÃO, v. 5, p. 217-01-217-13, 2020.
- Lucas dos Anjos, Michell. S. Costa, Regina C. Almeida. **Characterizing the existence of hydra effect in spatial predator-prey model sand the influence of functional response type sand species dispersal.** ECOLOGICAL MODELLING, v.428, p.109 109, 2020.

#### 4.2. Artigos Científico sem Periódicos: Submetidos e Preprints

- Diego T. Volpato, Anna C. M. Resende, Lucas dos Anjos, Joao V. O. Silva, Claudia M. Dias, Regina C. Almeida, and Sandra M. C. Malta. Spreading of COVID-19 in Brazil: Impacts and uncertainties in social distancing strategies. medRxiv:10.1101/2020.05.30.20117283,p.134,2020. (submetido para publicação no Journal of Simulation)
- Diego T. Volpato, Anna C. M. Resende, Lucas dos Anjos, João V.O. Silva, Claudia M. Dias, Regina C. Almeida e Sandra M. C. Malta. Avaliação de estratégias de relaxamento do distanciamento social para o Brasil e Estado do Rio de Janeiro. SciELOPreprints:10.1590/SciELOPreprints.595,p.1-13,2020. (submetido para publicação na TEMA: Tendências em Matemática Aplicada)
- Gustavo B. Libotte, Lucas dos Anjos, Regina C. Almeida, Sandra M. C. Malta, Renato S. Silva. Enhancing the estimation of compartmental model parameters for COVID-19 data with a high level of uncertainty. (submetido para publicação no Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation)
- Lucas dos Anjos, Michel Iskin da S. Costa, Regina C. Almeida. Rapid spread agents may impair biological control in a tritrophic food web with intraguild predation. (submetido para publicação no Ecological Complexity-em revisão)
- Emanuelle A. Paixão, Gustavo T. Naozuka, João Vitor O. Silva, Maurício P. C. Menezes, Regina C. Almeida. Model Comparison and Uncertainty Quantification in Tumor Growth (submetido para publicação na TEMA: Tendências em Matemática Aplicada-em revisão)
- Isaac Santos, Sandra Malta, Andrea Valli, Lucia Catabriga, Regina Almeida. Convergence Analysis of the Dynamic Diffusion Method (submetido para publicação na Computers and Mathematics with Applications-em revisão)

#### 4.3. Artigos em Anais de Eventos

- Gustavo T. Naozuka, Heber L. Rocha, Regina C. Almeida. Hybrid multiscale modeling of tumor growth with chemotherapeutic drug dispersion, XLI CILAMCE, 16-19 November, 2020.
- Gustavo T. Naozuka, Regina C. Almeida. Método do gradiente adaptativo para o controle ótimo de um modelo com terapia anti câncer. X ERMAC RS, 1-3 dezembro, 2020.

#### 4.4. Participação em Eventos Científicos

- III EncBioMat (UNICAMP, fev/2020): Modelagem matemática da perda de antígeno na imuno terapia com células CAR T (EAP, LB, RA); Modelagem matemática da imunoterapia com células CAR T (MP, LB, RA); Controle ótimo aplicado a um modelo de crescimento tumoral com tratamento (GN, RA).

#### 4.5. Desenvolvimento de Programas e Produtos

- CarTmath-(Processo#512020001606-5).  
Disponível: <https://github.com/tmglncc/CARTmath>  
Autoria: Emanuelle A. Paixão, Andrea Valli, Gustavo Naosuka, Luciana R C Barros, RA  
CarTmath is a user friendly interface using R package Shiny to run the three compartment mathematical model. This model describes the tumor response to CAR T cell immunotherapy in immunodeficient mouse models. It encompasses interactions between tumor cells, effector, and long term memory CAR T cells such as tumor induced immunosuppression effects, conversion of memory T cells into effector T cells in the presence of tumor cells, and individual specificity considered as uncertainties in the parameters of the model.

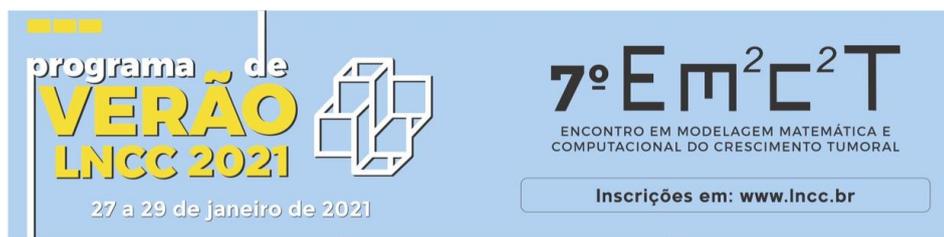
#### 4.6. Dissertações e Teses Defendidas

- Anna Claudia M. de Resende (21/12/2020)  
Título: Toward Predictive Computational Models of Breast Cancer Development and Treatment  
Orientadores: R A e Ernesto A. B. F. Lima

### 5 Atividades Projetadas para 2021

- realização do VII Encontro de Modelagem Matemática e Computacional do Crescimento Tumoral - EM<sup>2</sup>C<sup>2</sup>T

(<http://www.tmg.lncc.br/events.html>)



Keynote lectures: Gabor Balazsi (Stony Brook University), Mark Chaplain (University of St. Andrews), J. Tinsley Oden (UT at Austin)

- defesa da dissertação de João Vitor de O. Silva, intitulada *Surrogate models in tumor growth*;

- submissão de artigos em periódicos indexados:
  - Bayesian inference using Gaussian Process surrogates in cancer modeling, H. L. Rocha, J. V. O. Silva, R. C. Almeida, and R. S. Silva
  - Sensitivity Analysis as a Tool for Tumor Growth Modeling, Anna Claudia M. Resende, Regina C. Almeida, Ernesto A. B. F. Lima, J. Tinsley Oden, Thomas E. Yankeelov
  - Model selection for assessing the effects of doxorubicin on triple negative breast cancer cell lines, Anna Claudia M. Resende, Ernesto A. B. F. Lima, Regina C. Almeida, Matthew T. Mc Kenna, J. Tinsley Oden, Thomas E. Yankeelov
  - CARTmath – A mathematical model of CAR T immunotherapy in xenografts, Emanuelle A. Paixão, Andrea Valli, Gustavo Naosuka, Artur Fassoni, Luciana R C Barros, R A
- participação em eventos e publicação de artigos completos:
  - CNMAC, ENMC, CILAMCE
- Início de colaboração com a FIOCRFUZ/Ba – projeto submetido na Plataforma Brasil, CNS
- Participação na Hub.Rio COVID19 FaperjC



# ESDA

ESTABILIZAÇÃO DE SISTEMAS DINÂMICOS E APLICAÇÕES



**Jaime Rivera**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O grupo de pesquisa tem como objetivo o estudo dos problemas de vibrações. Estudando a modelagem física dos problemas de oscilações e sua estabilização e aplicações à engenharia. Nosso principal objetivo é o estudo do problema de Desenho ótimo. Este problema consiste em encontrar a localização onde deve ser aplicado um mecanismo dissipativo de tal forma que na posição encontrada o mecanismo estabilize as oscilações no menor tempo possível. Este problema é muito estudado pelos engenheiros na construção de pontes ou de estruturas longas onde oscilações são potencializadas e podem crescer de forma descontrolada prejudicando a estrutura. Este problema desde o ponto de vista matemático ainda não está muito desenvolvido. Os engenheiros resolvem estes problemas a través de maquetas de alta precisão onde se realizam testes de estabilização. O problema matemático e a modelagem computacional por tanto estão em pleno desenvolvimento o que dá muita atualidade ao problema que tratamos.

## **1. Grupo de Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

- Gustavo Perla Menzala - COMAC
- André Novotny - COMAC
- Jaime Rivera - COMAC

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Gustavo Perla Menzala - COMAC
- André Novotny - COMAC
- Jaime Rivera - COMAC (coordenador)

#### **1.1.2. Alunos e pós-Doutores**

- Pós-Doutores: Mauro de Lima Santos
- Doutorandos: Bruna Sozzo UEL - LNCC  
                  Andrea Martinho UFRRJ - UFRJ  
                  Leandro Tomaz de Araujo UFRRJ – UFRJ

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:

Hugo Fernandes Sare - UFJF

Carlos Alexande Baldez - UFPA

Sebastião Cordeiro - UFPA

Andreia Malacarne - UFSJR

Marcio Jorge - UEL - Londrina

Ma To Fu - USP - São Carlos

Carlos Alexandre Baldes UFPA

Mauro de Lima Santos UFPA

- Internacionais:

Reinhard Racke, Universidade de Konstanz (Alemanha)

Zhuangyi Liu, Universidade de Minnesota USA

Maria Grazia Naso, Universidade de Brescia (Italia)

Ramon Quintanilla, Politécnico de Catalunya. (Espanha)

Yuming Qin, Hanan University (China)

Tomas Carabayo, Universidad de Andaluzia (Espanha)

Vilmos Komornik, Universidade de Strassbourg (França)

Farid Ammar Khodja, Universidade de Besançon (França)

## 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- Estabilização de Sistemas Dinâmicos e Aplicações.
- Controle exato de sistemas hiperbólicos com aplicações a teoria da elasticidade.

## 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- GA-014 Metodos Matemáticos III.
- GB-050 Análise Funcional.
  - Estudo Dirigido: Teria espectral e aplicações às EDP.
  - Projetos de Pesquisa

## 2. Projetos de Pesquisa

### 2.1. Projeto 1

Estabilidade de sistemas dinâmicos, controle e aplicações. Neste projeto desenvolvemos técnicas da teoria de operadores para encontrar propriedades qualitativas do tipo assintóticas e regularizantes. Estas propriedades são de singular importancia para tratar dos problemas de desenho ótimo. Este problema consiste em determinar a posição onde o mecanismo dissipativo otimiza seus efeitos. Este projeto é apoiado pelo CNPq. Projetos No. 310249/2018-0, Período: 01/03/2019--28/02/2023.

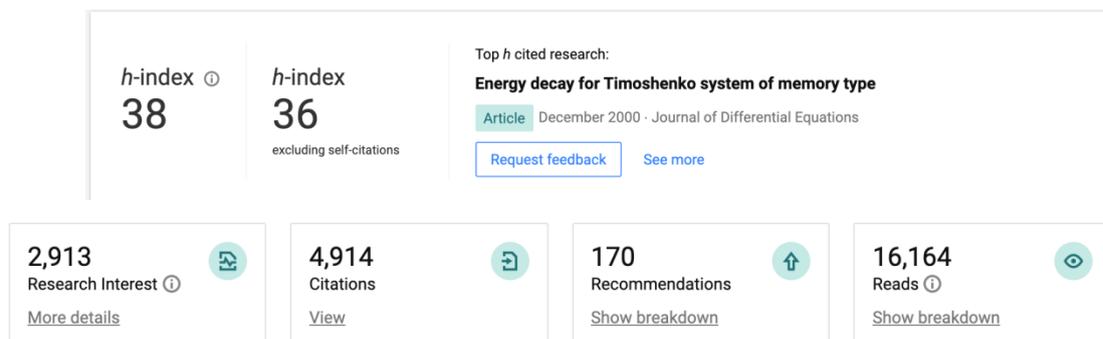
### 2.2. Projeto 2

Projeto: Workshop em Equações Diferenciais Parciais. Realizado anualmente no LNCC com apoio da CAPES, Faperj e CNPq.

## 3. Destaques Científicos e Tecnológicos

Descrever os resultados destacados do GP. Sugere-se utilizar entre meia e uma página por cada destaque. Estima-se o uso de uma figura por destaque para ilustrar o resultado destacado, caso haja alguma ilustração pertinente.

### 3.1. Destaque1. De acordo com o Reseachgate quase5 mil citações.



### 3.2. Destaque2

Nossos projetos de pesquisa sempre foram bem avaliados no CNPq. A bolsa de pesquisa que tenho vinculada ao LNCC data desde 1988. Ininterruptamente.

### 3.3. Destaque3

Distinguido como um dos 100 mil pesquisadores mais influentes do mundo. (600 do Brasil)

[https://www.lncc.br/noticia/Pesquisadores\\_do\\_LNCC\\_MCTI\\_entram\\_na\\_lista\\_dos\\_cientistas\\_mais\\_influentes\\_do\\_mundo/1647](https://www.lncc.br/noticia/Pesquisadores_do_LNCC_MCTI_entram_na_lista_dos_cientistas_mais_influentes_do_mundo/1647)

## 4. Resultados Científicos e Tecnológicos

### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

1. [On Exponential Stability for Thermoelastic Plates: Comparison and Singular Limits](#)  
APPLIED MATHEMATICS & OPTIMIZATION[ ]  
Volume 0, Número 1, páginas 1 - 22 (2020). ISBN: 0095-4616 Qualis: M, C\*: 0  
With J. E. Munoz Rivera, R. Racke, M. Sepulveda, O. Vera Villagran.  
[MathReview](#); \* [Doi: 10.1007/s00245-020-09670-7](#)
2. [Decay rates for non-homogeneous thermoelastic and elastic Timoshenko systems with local equality of the speed of propagation](#)  
Volume 2015, Número 1, páginas 1 - 33 (2020). ISBN: Qualis: A1, C\*: 0  
With J.E. Munoz Rivera, Marcio Jorge da Silva, Ma To Fu.  
[MathReview](#); \*
3. [Asymptotic to systems with memory and non-local initial data](#)  
Reviews in Mathematical Physics[ ]  
Volume 32, Número 1, páginas 1 - 27 (2019). ISBN: 0129-055X Qualis: B4, C\*: 0  
With Jaime E. Munoz Rivera, Veronica Pobleto, Juan C. Pozo and Octavio Vera.  
[MathReview](#); \* [Doi: 10.1142/S0129055X20500142](#)
4. [Dynamics of a Non-linear Stochastic Viscoelastic Equation with Multiplicative Noise](#)  
JOURNAL OF PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATIONS[ ]  
Volume 32, Número 1, páginas 304 - 325 (2019). ISBN: 2079-732X Qualis: B4, C\*: 0  
With CARABALLO Tomas, PINA Nicolas, MUNOZ Rivera Jaime.  
[MathReview](#); \* [Doi: 10.4208/jpde.v32.n4.2](#)

### 4.2. Palestra à Convite

Palestra convidado na Universidade de Hanan China.

### 4.3. Dissertações e Teses Defendidas

Tese em andamento.

Exame de qualificação da Bruna Sozzo.

## 5. Atividades Projetadas para 2021

Continuação dos projetos

Estabilidade de sistemas dinâmicos, controle e aplicações. Projetos No. 310249/2018-0, Período: 01/03/2019--28/02/2023.

Projeto: Workshop em Equações Diferenciais Parciais, presencial. Realizado anualmente no LNCC com apoio da CAPES, Faperj e CNPq.

Defesa de Tese de Doutorado da Aluna Andrea Martinho (UFRJ)

Organização do XIX Workshop em Equações Diferenciais Parciais

Realizar visita científica as seguintes Universidades

- Universidade de Konstanz.
- Universidade de Brescia
- Universidade de Catalunya
- Universidade de Chile

Desenvolver o projeto de pesquisa: Sistemas Dinâmicos e aplicações. em conjunto com os alunos de Pos Doutorado: Sebastião Martin Cordeiro da UFPA, com projeto em análise pelo CNPq.

Desenvolver o projeto de pesquisa: Sistemas Dinâmicos e aplicações. em conjunto com os alunos de Pos Doutorado: Carlos Alexandre Baldez da UFPA, com projeto em análise pelo CNPq.

Desenvolver o projeto de pesquisa: Sistemas Dinâmicos e aplicações. em conjunto com os alunos de Pos Doutorado: Mauro de Lima Santos da UFPA, com projeto em análise pelo CNPq.

## 6. Outras Informações Relevantes

Membro de corpo editorial dos journals

- Mathematical Methods in Applied Sciences,
- Journal of Applied Mathematics (JAM),
- Bulletin of the South Ural State University,
  
- Mathematical and Computational Applications,

além de participar como referee de decenas de jornais científicos.

Membro titular do grupo PRONEX do IMPA período 2019-2023



# GCON

SISTEMAS E CONTROLE



**Marcos Garcia Todorov**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

A área de pesquisa “Sinais e Sistemas” (ou “Sistemas e Controle”) compreende, fundamentalmente, problemas matemático-computacionais envolvendo equações diferenciais e de diferenças, frequentemente oriundos da representação matemática de problemas de análise e decisão em engenharia e economia. Alguns problemas emblemáticos dessa área são os de análise de estabilidade e desempenho e de síntese de controladores, estimadores e filtros para processamento de sinais, bem como modelagem financeira. Tais problemas dão origem a múltiplas formulações específicas em consonância com o tipo dos modelos matemáticos tratados (determinísticos ou estocásticos, a tempo contínuo ou a tempo discreto, lineares ou não-lineares, de coeficientes constantes ou que variam no tempo, de dimensão finita ou infinita) e com a consideração de diferentes tipos de incerteza associadas aos mesmos (“set-theoretic” ou probabilística, para métrica ou não-paramétrica). No LNCC esta área de pesquisa tem sido ativa desde o início dos anos 80, concentrando-se hoje nos temas gerais de estabilidade e controle estocástico e aplicações, controle e filtragem em presença de incertezas de modelagem, processamento de sinais acústicos e elétricos, e métodos estocásticos em finanças.

## **1 Grupode Pesquisa**

### **1.1. Equipe**

#### **1.1.1. Pesquisadores**

- Jack Baczynski – COMAC, (DSc, UFRJ, 2000),
- Marcelo D. Fragoso – COMAC, (PhD, Imperial College of Science and Technology, UK, 1986),
- Marcos G. Todorov – COMAC, (DSc, LNCC, 2011),
- Paulo A. A. Esquef – COMAC, (DSc (Tech), Helsinki University of Technology, 2004).

#### **1.1.2. Alunos e Pós-Doutores**

- Pós-Doutores:

1. Caio César G. Rodrigues,
2. Estevão Rosalino Junior,
3. José Cristiano Pereira.

- Doutorandos:

1. Allan Jonathan da Silva
2. Dayana Cristine dos Santos
3. Felipe Otávio dos Santos
4. Fortia Vila Verges
5. Marcelo Britto Martins

- Mestrandos:

1. Paulo Vitor da Mota Silva

#### **1.1.3. Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais:

1. Carlos E. De Souza – LNCC (Pesquisador Colaborador),
2. Paulo C. M. Vieira – LNCC (Pesquisador Colaborador),
3. Oswaldo L. V. Costa – EP/USP,
4. Edilson Fernandes de Arruda – UFRJ,
5. Saul de Castro Leite – UFABC,
6. Telles Timóteo da Silva – UFSJ,

7. J. V. M. Vicente – BACEN (Banco Central do Brasil) e IBMEC,
8. Alberto Ohashi – UNB.

- Internacionais:

1. Francesco Russo – ENSTA Paris Tech,
2. Michael Högele – Universidad de los Andes (Colombia).

## 1.2. Pesquisa e Desenvolvimento

- **Tema 1: Métodos de Controle e Filtragem para Classes de Sistemas Dinâmicos Não Lineares.** Este projeto trata de problemas de controle e filtragem para classes de sistemas dinâmicos não lineares quadráticos e sistemas com não linearidade Lipschitz locais. Ênfase é dada ao projeto de sistemas de controle e de filtros não lineares que garantam estabilidade e desempenho regional, i.e. em uma região no entorno de um ponto de equilíbrio.
- **Tema 2: Filtragem e Controle de Sistemas Dinâmicos com Saltos Markovianos (SDSM) e Observações Parciais.** Uma classe ampla de sistemas complexos atualmente encontrados nos projetos de engenharia são inerentemente vulneráveis a mudanças abruptas (p. ex., falhas) de seus componentes. Por isso, é necessário projetar políticas de controle capazes de manter o sistema com um desempenho aceitável, mesmo na presença de falhas. Nesse contexto, uma teoria que tem se destacado e tem sido amplamente utilizada em aplicações (em áreas tais como *sistemas de comunicações, robótica, economia*, dentre outras), é conhecida na literatura especializada como a teoria de SDSM. No cenário de observações parciais, objetiva-se aqui avançar no estudo de duas situações (certamente as mais difíceis): (a) observações parciais da cadeia de Markov; e (b) observações parciais tanto do estado como da cadeia de Markov. Também são tratadas questões de performance e robustez de SDSM, com interesse particular em problemas com duas escalas de tempo.
- **Tema 3: Modelagem de Sistemas e Sinais Discretos.** Objetiva o emprego de técnicas de modelagem de sinais e sistemas discretos para análise, síntese e processamento de sinais, como por exemplo, no problema de estimação paramétrica de sincrofasores sujeitos a descontinuidades em fase ou magnitude, para aplicação em calibração de PMU.
- **Tema 4: Métodos Estocásticos com Aplicação em Finanças.** Tem como objetivo utilizar métodos estocásticos no estudo de precificação de derivativos em mercados financeiros nos seguintes cenários:
  - (1) precificação em mercados de renda fixa subscritos em dinâmicas de taxa de juros bastante gerais representadas por modelos de difusão do tipo afim admitindo volatilidade estocástica, saltos e salto na volatilidade.
  - (2) precificação e obtenção de estimativas de preço no mercado de ações, de opções Multi-asset com barreiras tipo hiperplano e barreiras na forma de superfícies mais gerais em dinâmicas do tipo Black-Scholes;
  - (3) precificação de derivativos gerais, tanto em mercados de renda fixa como de ações, subscritos em modelos com volatilidade estocástica do tipo local vol (local volatility), portanto compatíveis com a formulação de Feynman-Kac.

- Tema 5: **Controle de Sistemas Dinâmicos com Saltos Markovianos e Perturbações Brownianas Fracionárias.** Embora a teoria clássica de controle estocástico de sistemas dinâmicos perturbados por movimentos Brownianos tenha sido amplamente comemorada como uma grande conquista na análise estocástica e de importância fundamental em aplicações, existe uma percepção clara que há uma ampla gama de aplicações nas quais a modelagem através de movimento Browniano da perturbação aditiva não é totalmente adequada. Isto está relacionado, em parte, à questão da *dependência de longo alcance* (observa-se que o movimento Browniano tem incrementos independentes). Exemplos em *economia, hidrologia, reconhecimento de fala, processamento de imagem e comunicação em rede* resumem algumas áreas em que esse problema é crítico e a modelagem via perturbações Brownianas fracionárias (fBm) tem sido utilizada. A grande dificuldade em lidar com fBm é o fato desse processo não ser nem uma semimartingale nem um processo de Markov não sendo possível portanto a utilização da maquinaria disponível do cálculo estocástico clássico. Os resultados preliminares para problemas de controle ótimo estão restritos ao caso linear. Objetiva-se aqui avançar no problema de controle ótimo para o cenário de sistemas dinâmicos lineares com saltos Markovianos.

### 1.3. Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas no programa de Pós-Graduação do LNCC
  1. GA-001 Álgebra Linear – 2º Período,
  2. Uma Introdução ao Cálculo e à Álgebra Linear – 2º Período,
  3. GA-038 Processamento Digital de Sinais – 3º Período,
  4. Uma Introdução ao Cálculo e à Álgebra Linear – 4º Período,
  5. GA-001 Álgebra Linear – 4º Período,
  6. GA-028 Probabilidade e Processos Estocásticos – 4º Período.
- Mini-cursos / Escolas / Congressos
  1. Processamento Digital de Sinais para Análise Tempo-Frequência: Aplicações em Áudio (minicurso no PV/LNCC, 2020).

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1. Métodos de Controle e Filtragem para Classes de Sistemas Dinâmicos Não Lineares

*Resumo:* Este projeto trata de problemas de controle e filtragem para classes de sistemas dinâmicos não lineares quadráticos e sistemas com não linearidade Lipschitz locais.

Ênfase é dada ao projeto de sistemas de controle e de filtros não lineares que garantam estabilidade e desempenho regional, i.e. em uma região no entorno de um ponto de equilíbrio.

Vigência: 01/03/2017 – 28/02/2022.

Financiamento: CNPq (Bolsa de Produtividade em Pesquisa – nível 1A)

## **2.2. Sistemas Sujeitos a Incertezas: Modelagem, Filtragem, Controle e Aplicações**

*Resumo:* Esse projeto de pesquisa trata de problemas de *modelagem*, de estabelecer critérios de *estabilidade* assim como desenvolver estratégias relevantes de *controle* e *filtragem*, para algumas classes importantes de sistemas dinâmicos sujeitos a incertezas. O projeto contempla também *aplicações de métodos estocásticos a problemas práticos*. Além dos distúrbios aditivos usuais, e incertezas paramétricas, nesse projeto de pesquisa estamos particularmente interessados na classe dos sistemas que estão também sujeitos a incertezas nas suas estruturas como consequência de *fenômenos abruptos*.

Vigência: 01/03/2016 – 28/02/2021.

Financiamento: CNPq (Bolsa de Produtividade em Pesquisa – nível 1A)

## **2.3. Sistemas Dinâmicos Sujeitos a Incertezas**

*Resumo:* Este projeto de pesquisa tem como objetivo utilizar métodos estocásticos avançados e robustos para solucionar problemas relevantes de modelagem, estimação e controle associados a *sistemas sujeitos a incertezas*. O projeto contempla diversas questões teóricas e aplicações no tema que denominamos *sistemas dinâmicos multi-modelo estocásticos*, que inclui a classe dos *processos de Markov determinísticos por partes* (PMDP) e os *sistemas com saltos Markovianos* (SSM), que é uma área de pesquisa comum a grande parte dos participantes do projeto.

Vigência: 01/06/2016 – 30/12/2020. Financiamento:

CNPq (Projeto Universal)

## **2.4. Stochastic analysis of non-Markovian phenomena**

*Resumo:* O objetivo desse projeto é estudar algumas questões fundamentais de análise estocástica para *sistemas não-Markovianos*. O objetivo é desenvolver novas técnicas e resolver problemas concretos em três diferentes tópicos: (1) análise de funcionais de fórmulas tipo Itô sob uma família de medidas de probabilidade de variação finito-quadrática não-dominada; (2) solução do problema de controle ótimo estocástico para equações diferenciais estocásticas perturbadas por movimentos Brownianos fracionários (3) estudo da dinâmica estocástica para sistemas dependentes de trajetórias, perturbadas por ruídos de Lévy.

Vigência: 01/01/2019 – 01/01/2021.

Financiamento: MATH-AMSUD/CAPES (MATH-AMSUD)

## **2.5. Probabilidade e Combinatória**

*Resumo:* Tem como objetivo agregar pesquisadores que trabalham com métodos estocásticos e probabilísticos e suas aplicações. Dentre os tópicos de pesquisa previstos incluem-se: sistemas de partículas, análise de tráfego pesado, combinatória e controle estocástico.

Vigência: 01/01/2019 – 01/01/2021.

Financiamento: FAPERJ/CNPq (PRONEX – Programa de Apoio a Núcleos de Excelência no Estado do Rio de Janeiro).

### 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

#### IEEE Senior Member grade

Seleção de pesquisador como *membro sênior* do IEEE (Institute of Electrical and Electronics Engineers), na reunião de 20/jun/2020.

#### Member of the IFAC Technical Committee

Seleção de pesquisador como membro do comitê técnico da IFAC (International Federation of Automatic Control), na área 1.4 (Stochastic Systems), para o triênio 2020–2023.

### 4 Resultados Científicos e Tecnológicos

#### 4.1. Artigos Científicos em Periódicos

1. de Oliveira, A. M.; Costa, O. L. V.; Fragoso, M. D.; Stadtmann, F. “Dynamic Output Feedback Control for Continuous-time Markov Jump Linear Systems with Hidden Markov Models”. *International Journal of Control* (<http://dx.doi.org/10.1080/00207179.2020.1817566>).
2. Verges, F. V. ; Fragoso, M. D. “Stationary Linear Mean Square Filter for the Operation Mode of Continuous-Time Markovian Jump Linear Systems”. *Ann. Acad. Rom. Sci. Ser. Math. Appl.*, v. 12, p. 501-521, 2020 (artigo convidado para o *festschrift* de Vasile Dragan).
3. Coutinho, D. ; de Souza, C. E.; Kinnaert, M.; Schons, S. “Robust Observer Design for a Class of Discrete-time Nonlinear Singular Systems with Persistent Disturbances”. *International Journal of Adaptive Control and Signal Processing*. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/acs.3183> (18 páginas).
4. Coutinho, D.; de Souza, C. E.; Silva Junior, J. M. G.; Caldeira, A.; Prieur, C. “Regional Stabilization of Input-Delayed Uncertain Nonlinear Polynomial Systems”. *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 65, p. 2300–2307, 2020.
5. Carnivali, G. S.; Vieira, A. B.; Ziviani, A.; Esquef, P. A. A. “CoVeC: Coarse-Grained Vertex Clustering for Efficient Community Detection in Sparse Complex Networks”. *Information Sciences*, v. 522, p. 180– 192, 2020.
6. dos Santos, F. O.; Todorov, M. G. “Mean Stability and L1 Performance of a Class of Two-Time-Scale Markov Jump Linear Systems”. *Mathematics of Control Signals and Systems*. <http://dx.doi.org/10.1007/s00498-020-00270-y>

#### 4.2. Artigos em Anais de Eventos

1. Rosalino Jr., E.; Baczynski, J. “Closed-Form Expressions for Pricing Multi-Asset Options with Hyperplane Barriers”. In: *XX Encontro Brasileiro de Finanças*, 2020, Rio de Janeiro.
2. Guevara, K.; Fragoso, M. D. “Stochastic Differential Equations driven by Fractional Brownian Motion with Markovian Switching”. In: *CN-MAC – XXXIX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, 2020. v. 7.
3. Verges, F. V.; Fragoso, M. D. “Optimal Linear Mean Square Filter for Markov Jump Linear Systems with Hidden Markov Chain and Partial Observations of the State”. In:

2020 European Control Conference, Saint Petersburg – Russia. Proceedings of the 2020 European Control Conference, 2020, pp. 1395–1400.

4. Verges, F. V.; Fragoso, M. D. “Optimal Linear Mean Square Filter and an Associated Stationary Filter for Hidden Markov Chain”. In: 59th IEEE Conference on Decision and Control, 2020, Jeju Island, Republic of Korea. Proceedings of the 59th IEEE Conference on Decision and Control, 2020.
5. Leite, S. C.; Fragoso, M. D. “Numerical Method for Ergodic Optimal Control Problems of Switching Stochastic Differential Equations with Reflection”. In: 59th Conference on Decision and Control, 2020, Jeju Island, Republic of Korea. Proceedings of the 59th Conference on Decision and Control, 2020.

#### **4.3. Participação em Eventos Científicos**

1. XX Encontro Brasileiro de Finanças, 2020, Rio de Janeiro
2. 2020 European Control Conference, Saint Petersburg – Russia.
3. 59th IEEE Conference on Decision and Control, 2020, Jeju Island, Republic of Korea.
4. CNMAC – XXXIX Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional, 2020.

#### **4.4. Palestras a Convite**

1. “Modelagem e Controle de Sistemas Lineares com Saltos Markovianos”, ministrada por Marcos Todorov no ciclo comemorativo dos 40 anos do LNCC em 20/07/2020.
2. “Processamento de Sinais e Estimação de Sincrofasores no Contexto de Metrologia e Qualidade da Nova Matriz de Energia Elétrica”, ministrada por Paulo Esquef no ciclo comemorativo dos 40 anos do LNCC em 20/07/2020.

#### **4.5. Dissertações e Teses Defendidas**

- Felipe Otávio dos Santos: “Modelagem e Análise de Sistemas Lineares com Saltos Markovianos em Duas Escalas de Tempo” (Tese de Doutorado/LNCC; defesa marcada para 14/12/2020).

### **5 Impactos da pesquisa na sociedade**

Temas 1, 2 e 5

- Desenvolvimentos de métodos teóricos e computacionais que poderão, futuramente, ser aplicados no aprimoramento do desempenho e da robustez de sistemas robóticos, de veículos aéreos não-tripulados, de sistemas de comunicação, e de modelos epidemiológicos, por exemplo.

#### Tema 3

- Redução de preço de energia elétrica e de prejuízos no setor produtivo, promovido pela maior qualidade e estabilidade de geração e distribuição de energia elétrica, em uma matriz mista com mais fontes renováveis de geração.

## Tema 4

- Alguns resultados em métodos estocásticos em finanças, obtidos pelo grupo, são de utilidade na precificação mais precisa de derivativos na bolsa de valores no Rio e São Paulo.

## **6 Atividades Projetadas para 2021**

- Dar continuidade aos projetos de pesquisa elencados nesse relatório,
- Escrever artigos científicos para conferências e periódicos,
- Orientações de mestrado e doutorado,
- Supervisões de pós-doutorado,
- Ministrando cursos,
- Participação em conferências internacionais,
- Participação em bancas de Mestrado e Doutorado,
- Consultoria ad hoc para instituições de fomento,
- Participações em comissões,
- Participações em comissões e conselhos internos do LNCC,
- Divulgação científica.

## **7 Outras Informações Relevantes**

Dentre outras atividades e resultados relevantes referentes ao GCON em 2020, destacam-se:

1. Segundo o *Book Performance Report* da Springer-Verlag de 2020, relativo ao ano de 2019, o livro “Continuous-Time Markov Jump Linear Systems”, de autoria dos pesquisadores do LNCC Marcelo D. Fragoso e Marcos G. Todorov, em conjunto com Oswaldo L. V. Costa da EP/USP, desde a sua publicação on-line em 18 de dezembro de 2012, teve um total de 21.173 downloads de capítulos do eBook no SpringerLink.
2. Participações em Bancas de Mestrado e Doutorado
  - Lucas Neves Egidio, “Contributions to Switching Affine Systems Control Theory with Applications in Power Electronics”, 2020. Tese (Doutorado em Engenharia Elétrica) – Faculdade de Engenharia Elétrica e Computação da UNICAMP.
3. Exames de Qualificação e Seminários Obrigatórios de Orientandos do GCON em 2020
  - Dayana Cristine dos Santos – Seminário Obrigatório.
  - Felipe Otávio dos Santos – Seminário Obrigatório.
4. Divulgação Científica
  - Produção de vídeo-aulas sobre processamento digital de sinais e sistemas lineares. (<https://www.youtube.com/c/LPSLNCCLNCC>)

- Laboratório de Processamento de Sinais (LPS): criado no início de 2010, tem como principais objetivos: prover no LNCC infra-estrutura para pesquisa aplicada em processamento digital de sinais e disponibilizar à comunidade o material (artigos, códigos, dados, demonstrações, etc.) relacionado à pesquisa feita na área. (Ips.lncc.br; <https://www.youtube.com/c/LPSLNCCLNCC>)

5. Membro da Comissão PCI do IMPA.

6. Consultor Ad Hoc das seguintes instituições de fomento:

- FAPESP,
- CNPq,
- FAPERJ.

7. Participações em Comissões e Conselhos Internos

- Conselho Técnico Científico – CTC.
- Comissão PCI.
- Comissão de Exame de Qualificação.
- Comissão de Biblioteca.
- Comissão de Avaliação e Seleção – CAS.
- Comitê de Pós-Graduação – CPG.
- Coordenação do Programa de Iniciação Científica e Tecnológica (PIBIC/PIBITI).
- Comissão Organizadora do Programa de Verão LNCC – 2020.



# ComCiDis

COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA DISTRIBUÍDA



**Bruno Schulze**

RESPONSÁVEL



## RESUMO

O grupo ComCiDis atua desde 2002 no tema de Computação Científica Distribuída e Aplicações, atuando no desenvolvimento do ambiente computacional, interfaces e aplicações, com o objetivo de facilitar a execução sobre o ambiente implantado. A missão do grupo é o desenvolvimento e o estudo de ambientes de computação científica distribuída, em nível nacional, integrados por meio de uma infraestrutura computacional escalável de nuvens, grades e clusters geograficamente distribuídos em diferentes centros do país, capaz de permitir o acesso às facilidades computacionais (equipamentos, aplicações e serviços) de forma confiável, consistente e de custo acessível.

## **1 Grupo de Pesquisa**

### **1.1 Equipe**

#### **1.1.1 Pesquisadores**

- COMAC: Bruno Schulze (coordenador), Renato Portugal, Fabio Porto, Antonio Tadeu, Gilson Giraldi, Pablo Blanco
- COTIC: Fabio Borges

#### **1.1.2 Alunos e pós-Doutores**

- Pós-Doutores: Mariza Ferro (LNCC)
- Doutorandos: André M. Yokoyama (LNCC)
- Mestrandos: Gabrieli D. Silva (LNCC), Jonatan Gall (IME-RJ)
- Mestrandos: Vinícius P. Kloh (LNCC) (até Set.)
- IC: Vitor Carlos Soares de Sá (Faeterj), Vitor Gonçalves Vieira (Faeterj)
- Projeto: Felipe Bernardo de Paula (LNCC)
- Projeto: Matheus Gritz (LNCC) (até Nov.)

#### **1.1.3 Pesquisadores Colaboradores**

- Nacionais: Antonio R Mury (CASNAV), Fabio Lopes Licht (UCP), Luis Erpen de Bona (UFPR), Raquel Pinto (IME-RJ), Vinod Rebello (IC/UFF), Jose Neuman (UFC), Luiz Bittencourt (Unicamp), Giacomo Mc. Evoy (Bull-Atos).
- Internacionais: Rajkumar Buyya (U.Melbourne, AU), Omer Rana (U.Cardiff, UK), Manish Parashar (Rutgers, US), David Abramson (AU), Geoffrey Fox (U. Indiana, US).
- John Towns e Jay Roloff: no projeto Cyberenvironments, de colaboração internacional, no contexto de Computação Científica de Alto Desempenho (sem fonte de financiamento) com o National Center for Supercomputing Applications (NCSA/USA) desde 2004.

### **1.2 Pesquisa e Desenvolvimento**

- Tema 1 - Computação de Alto Desempenho: Avaliações de desempenho e consumo energia, novas arquiteturas de HPC com baixo consumo de energia. Avaliações para a computação científica
- Tema 2 - Computação em Nuvem: Pesquisa na avaliação de arquiteturas de sistemas de computação, desenvolvimento de novos algoritmos, de novas configurações de uso, de novas arquiteturas de processamento, no contexto de computação em larga escala no contexto de Nuvens privadas e/ou públicas.
- Tema 3 - Convergência entre Inteligência Artificial (IA) e HPC - Green AI: Envolve o uso de IA para aprimorar simulações e sistemas de HPC e a avaliação de diferentes arquiteturas de HPC para treinar algoritmos de IA, entender e otimizar seu desempenho nessas diferentes arquiteturas. Busca de IA e HPC mais ecológica.

### 1.3 Ensino/Formação de Recursos Humanos

- Disciplinas em programas de Pós-Graduação:
  - GB-500 - Introdução ao Aprendizado de Máquina (Mariza Ferro)
- Mini-cursos / Escolas / Congressos
  - XVII Workshop em Clouds e Aplicações (WCGA), 07 de Dezembro de 2020.  
<http://wcga.lncc.br/2020/>
  - Schulze, B, et al., Intl. Workshop on Cloud and Edge Computing, and Applications Management (CloudAM), Dez.2020

## 2 Projetos de Pesquisa

### 2.1 Computação Científica Distribuída de Alto Desempenho como IaaS

**Descrição:** Atrair pesquisas, sejam trabalhos teóricos, práticos, assim como estudos experimentais, tanto da academia quanto indústria, relacionados a todos os aspectos de Computação em Nuvem.

**Impacto:** Projeto de pesquisa do CNPq nível 1 habilita o pesquisador a novas chamadas de projeto de agências de fomento e pós-graduação. Orientação de alunos de doutorado, mestrado e iniciação científica e tecnológica.

**Período de vigência:** 2018 - 2022

**Fonte de financiamento:** CNPq

### 2.2 Computação Científica Distribuída de Alto Desempenho como Serviço

**Descrição:** ComCiDis foi um dos 10s a trazer o conceito de Computação em Nuvem voltados à computação científica. Algumas referências citam a integração da Computação em Nuvem e a Internet das Coisas enquanto outras ressaltam os aspectos críticos na integração no que se refere a qualidade de serviço e qualidade da experiência.

**Impacto:** Apoio a pesquisadores CNPq nível 1. Pesquisa de relevância mundial e alinhada às estratégias do Brasil na área de ciência e tecnologia. Durante o período foram feitas publicações em periódicos além da formação de recursos humanos.

**Período de vigência:** 01/01/2017 a 30/09/2020

**Fonte de financiamento:** FAPERJ

### 2.3 Avaliação de Desempenho e Consumo de Energia para Computação Científica de Alto Desempenho

**Descrição:** Pesquisas teóricas e práticas sobre aspectos de desempenho e consumo de energia em HPC, fundamental para a descoberta de conhecimento que viabilize essa nova geração de aplicações e computadores exaescala. Pesquisas teóricas e práticas sobre aspectos de desempenho e consumo de energia de algoritmos de Inteligência Artificial.

**Impacto:** Esta pesquisa coloca este trabalho em tema de pesquisa de relevância mundial e alinhada às estratégias do Brasil na área de ciência e tecnologia. Durante o período foram feitas duas publicações em anais de eventos além da formação de recursos humanos.

**Período de vigência:** 01/09/2018 a 31/08/2021

**Fonte de financiamento:** Faperj Edital E 05/2018 - Bolsa TCT

## **2.4 Uso de Aprendizado de Máquina para Melhorias no Desempenho e no Consumo de Energia em Sis- temas HPC**

Descrição: A Computação Científica tem sido indispensável para avanços em diversos domínios de investigação por oferecer grande capacidade de recursos computacionais os quais permitem a execução de simulações numéricas complexas. Porém, algumas áreas ainda necessitam de maior poder computacional para realização de simulações cada vez mais precisas. Para viabilizá-las, os sistemas de Computação de Alto Desempenho (HPC) passam por constantes evoluções. Neste sentido, tem-se buscado o desenvolvimento de supercomputadores e estratégias que viabilizem o seu desenvolvimento, como a orquestração de recursos computacionais de maneira mais eficiente, em termos de desempenho e eficiência energética. Entre os desafios encontrados para atingir estes avanços estão a análise e a previsão de desempenho e de consumo de energia para diferentes classes de aplicações científica em diferentes arquiteturas computacionais. Portanto, neste trabalho é proposto o estudo e o uso de técnicas de Aprendizado de Máquina (AM) para compreender os requisitos das aplicações científica e das arquiteturas de HPC, bem como suas relações influenciam no uso dos recursos computacionais e no consumo de energia. Ainda, o uso de AM será avaliado como técnica para o desenvolvimento de modelos preditivos para o desempenho e o consumo de energia sobre a execução de uma aplicação em diferentes arquiteturas.

Período de vigência: 01/08/2019 a 30/09/2020

Fonte de financiamento: Faperj E-01/2019 - Bolsa Nota 10 - Mestrado - Edição Agosto – 2019

## **2.5 Análise de Desempenho e Consumo de Energia dos Algoritmos de Aprendizado de Máquina em Am- bientes de HPC - Green AI**

Descrição: a convergência da HPC e IA tornou-se uma abordagem promissora, permitindo a redução significativa nos tempos de treinamento desses algoritmos. Além disso, há tempos, a eficiência energética é uma das preocupações cruciais no uso de ambientes HPC e que precisa ser considerada na execução desses algoritmos, que acontecem cada vez com maior frequência e relevância como solução para problemas complexos da humanidade. Por- tanto, com o desenvolvimento deste projeto de pesquisa, são esperadas contribuições com os requisitos necessários para a execução dos algoritmos de AM em diferentes ambientes de HPC, incluindo plataformas de nuvem computa- cional, para que de fato essas aplicações possam aproveitar toda a capacidade desses ambientes, evitando o desperdício do consumo de recursos computacionais e energético. Além disso, com o avanço da utilização dos algoritmos de IA em diversos domínios da ciência, espera-se que os resultados alcançados sobre o balanço entre desempenho e consumo energético possa contribuir para uma nova geração de algoritmos de AM mais eficientes. Ainda, são esperadas contribuições para a solução de problemas com a utilização de uma IA mais ecológica, visto que atualmente os processos de treinamento dos algoritmos de AM emitem considerável quantidade de dióxido de carbono.

Período de vigência: 01/03/2020 a 28/02/2021

Fonte de financiamento: Faperj E-01/2020 - Bolsa Nota 10 – Mestrado

## 2.6 Ciberambientes do INCT MACC

Descrição: Coordenação de uso de ciberambientes no contexto de aplicações de medicina assistida pela computação científica, aplicando essas novas tecnologias de virtualização e arquiteturas e avaliação de desempenho.

Período de vigência: 01/06/2016 a 01/06/2022

Fonte de financiamento: CNPq

## 3 Destaques Científicos e Tecnológicos

### 3.1 Projetos de Pesquisa na Convergência IA e HPC

A convergência da computação de alto desempenho (HPC) e Inteligência artificial (IA) tornou-se uma abordagem promissora para grandes melhorias de desempenho. Essa combinação tem muito a oferecer, para ambas as áreas e permite aos usuários recursos sem precedentes para a pesquisa científica. Nessa interação, a HPC pode ser usado pelos métodos de IA (HPC para AI) para executar e aprimorar o desempenho de seus algoritmos. Nessa convergência, envolve usar e avaliar diferentes arquiteturas de HPC para treinar algoritmos de IA, entender e otimizar seu desempenho em diferentes arquiteturas.

Por outro lado a IA para HPC pode ser subdividida em IA após HPC e autoajuste. No primeiro caso, os algoritmos de aprendizado de máquina (AM) são usados para entender e analisar os resultados das simulações no ambientes HPC. Envolve o uso do AM para entender as aplicações científicas como elas se relacionam com diferentes arquiteturas de HPC e o impacto desse relacionamento no desempenho e no consumo de energia. Está mais relacionado à descoberta de conhecimento e seu resultado pode ser usado no autoajuste. No autoajuste, a IA é usada para configurar os ambientes de HPC, para escolher o melhor conjunto de configurações e parâmetros para atingir algum objetivo, por exemplo, a economia de energia. Além disso, o AM é usado para a previsão de desempenho e consumo de energia, escalonamento de tarefas e ajustes de frequência e voltagem.

As pesquisas nessa área resultaram em 2020 em 3 palestras convidadas (ACM-GECCO 2020, Palestra Seminários PPGCOMP-Unioste, Palestra V Semana de Ensino, Pesquisa e Extensão do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, campus Volta Redonda) e 04 publicações (1 capítulo de livro e 3 trabalhos completos em Anais de Eventos):

- SILVA, GABRIELI; Klöh, Vinícius; Yokoyama, André; Gritz, Matheus; Schulze, Bruno; Ferro, Mariza. SMCis: Scientific Applications Monitoring and Prediction for HPC Environments In: Communications in Computer and Information Science. 1 ed.: Springer International Publishing, 2020, v.1171, p. 69-84.
- PAULA, F. B.; Silva, Gabrieli D.; Gritz, Matheus; Ferro, Mariza; Schulze, Bruno. Avaliação do Consumo de Energia e o Impacto da emissão de CO2 para algoritmos de Inteligência Artificial In: Congresso da Sociedade Brasileira de Computação - XIV Brazilian e-Science Workshop, 2020, Cuiabá Anais do XIV Brazilian e-Science Workshop. Porto Alegre: SBC, 2020. p.81 – 88
- Sá V.; Klöh, V.; Schulze, B.; Ferro, M. Análise de Desempenho e de Requisitos Computacionais Utilizando o Modelo Roofline: Um estudo para Aplicações de Inteligência Artificial e do NAS-HPC. Workshop de Iniciação Científica do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD-WIC, 2020.

- BERNARDO, Felipe; FERRO, Mariza; VIERA, Vitor; SILVA, Gabrieli; SCHULZE, Bruno. Em Busca de uma Inteligência Artificial Ecologicamente Viável: Um estudo de caso do Consumo Energético de Algoritmos de Árvore de Decisão. Anais Principais do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD 2020

Além disso, o trabalho de Vitor Carlos Soares de Sádestaque na Jornada Científica e Tecnológica do LNCC. (PIPIC-CNPQ) foi

## **4 Resultados Científicos e Tecnológicos**

### **4.1 Artigos Científicos em Periódicos**

- Kloh, H, Rebello, VEF, Boeres, C, Schulze, B, Ferro, M. Static job scheduling for environments with vertical elasticity. Concurrency Computat Pract Exper. 2020; 32:e5761. <https://doi.org/10.1002/cpe.5761>
- Agner Junior, Jair (Mestrado); Schulze, Bruno ; Ferro, Mariza ; Martins, Ernesto Rademaker ; Santos, Marcos. Modelo para previsão de posição de objetos em 3d. Brazilian Journal of Development, v. 6, p. 1873-1890, 2020

### **4.2 Livros e Capítulos de Livros**

- Silva, Gabrieli; Klöh, Vinícius; Yokoyama, André; Gritz, Matheus; Schulze, Bruno; Ferro, Mariza. SMCis: Scientific Applications Monitoring and Prediction for HPC Environments In: Communications in Computer and Information Science.1 ed.: Springer International Publishing, 2020, v.1171, p. 69-84.

### **4.3 Artigos em Anais de Eventos**

- PAULA, F. B.; Silva, Gabrieli D.; Gritz, Matheus; Ferro, Mariza; Schulze, Bruno. Avaliação do Consumo de Energia e o Impacto da emissão de CO2 para algoritmos de Inteligência Artificial In: Congresso da Sociedade Brasileira de Computação - XIV Brazilian e-Science Workshop, 2020, Cuiabá Anais do XIV Brazilian e-Science Workshop. Porto Alegre: SBC, 2020. p.81 - 88
- SÁ, V.; Klöh, V.; Shulze, B.; Ferro. M. Análise de Desempenho e de Requisitos Computacionais Utilizando o Modelo Roofline: Um estudo para Aplicações de Inteligência Artificial e do NAS-HPC. Workshop de Iniciação Científica do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD-WIC, 2020.
- BERNARDO, Felipe; FERRO, Mariza; VIERA, Vitor; SILVA, Gabrieli; SCHULZE, Bruno. Em Busca de uma Inteligência Artificial Ecologicamente Viável: Um estudo de caso do Consumo Energético de Algoritmos de Árvore de Decisão. Anais Principais do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD 2020.
- Agner Junior, Jair; Schulze, Bruno; Mury, A. Roberto; Ferro, Mariza; Santos, Marcos. Tracking Maneuver Target Using 3D Position Forecast Model with Estimated Speed by Least Squares Method. Proceedings IJCIEOM – International Joint Conference on Industrial Engineering and Operations Management. IJCIEOM 2020 (Aceito para publicação Nov. 2020)

#### 4.4 Participação em Eventos Científicos

- Apresentação trabalho: Avaliação do Consumo de Energia e o Impacto da emissão de CO2 para algoritmos de Inteligência Artificial. **Congresso da Sociedade Brasileira de Computação - XIV Brazilian e-Science Workshop, 2020**
- Apresentação de trabalho: Análise de Desempenho e de Requisitos Computacionais Utilizando o Modelo Roofline: Um estudo para Aplicações de Inteligência Artificial e do NAS-HPC. **Workshop de Iniciação Científica do XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD-WIC, 2020.**
- Apresentação de trabalho: Em Busca de uma Inteligência Artificial Ecologicamente Viável: Um estudo de caso do Consumo Energético de Algoritmos de Árvore de Decisão. **XXI Simpósio em Sistemas Computacionais de Alto Desempenho, WSCAD 2020.**

#### 4.5 Palestras à Convite

- Ferro, Mariza. V Semana de Ensino, Pesquisa e Extensão do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro, campus Volta Redonda. Palestra de encerramento do evento: Como a Inteligência Artificial pode Contribuir para um Mundo mais Ecológico. 02 de Dezembro, 2020.
- Ferro, Mariza. XXXIII CIUFLA. Palestra - O Papel da Inteligência Artificial no Combate Pandemia Covid-19. 02 de Dezembro, 2020.
- Ferro, Mariza. Semana Nacional de Ciência e Tecnologia - Evento MCTI. Como a Inteligência Artificial está Presente no seu Dia a Dia. 25 de Outubro de 2020.
- Gabrieli Silva e Felipe Bernardo. Semana Nacional de Ciência e Tecnologia - Evento LNCC. Como a IA pode Contribuir para um Mundo mais Ecológico. 23 de Outubro de 2020.
- Ferro, Mariza. Semana Nacional de Ciência e Tecnologia - Evento LNCC. Dos Games à Ciência em Inteligência Artificial e Computação de Alto Desempenho. 21 de Outubro, 2020.
- Ferro, Mariza. Seminários da Pós Graduação em Computação da Universidade Estadual do Oeste do Paraná Palestra - A Convergência entre Inteligência Artificial e Computação de Alto Desempenho. 20 de Outubro de 2020.
- Ferro, Mariza. Mesa Redonda Semana de Ciência e Tecnologia da UFF. Horizontes da Inteligência Artificial - Aspectos de Ética e Confiabilidade. 21 de Outubro, 2020.
- Ferro, Mariza. Pint of Science Petrópolis. Inteligência Artificial. 9 de Setembro, 2020
- Ferro, Mariza. Webinar O Mercado de Inteligência Artificial nos EUA. Inteligência Artificial - Capacidades e Limitações. 03 de Agosto, 2020.
- Ferro, Mariza. Mesa Redonda Computação e COVID-19: Como a tecnologia pode ajudar o mundo em meio à pandemia. Universidade Federal de Lavras. 04 de Junho, 2020.
- Ferro, Mariza. O coronavírus e a desigualdade socioeconômica: um modelo baseado em agentes para simular e avaliar o impacto de intervenções na redução da disseminação da COVID-19 no Rio de Janeiro. Hackovid LNCC 2020. Abril, 2020.

- Ferro, Mariza. ACM Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO). Keynote - The Convergence of Artificial Intelligence and High-Performance Computing Towards Green AI Solutions. July, 8th, 2020.
- Ferro, Mariza. Abertura do Ciclo de Palestras de Visão Humanística do Instituto Militar de Engenharia. Inteligência Artificial Ética e Confiável. Fevereiro, 2020.

#### **4.6 Dissertações e Teses Defendidas**

- Vinicius Prata Kloh. Mestrado em Modelagem Computacional - Laboratório Nacional de Computação Científica Use of Machine Learning for Improvements in Performance and Energy Consumption in HPC Systems. Setembro, 2020.

#### **4.7 Revisor de Periódico Internacional:**

- Concurrency and Computation. Practice Experience
- IEEE Computing in Science and Engineering
- The Journal of Supercomputing
- International Journal of Parallel, Emergent and Distributed Systems
- Future Generation Computer Systems (FGCS)
- Computer Communications
- Computer Networks

#### **4.8 Membro Corpo Editorial Periódico Internacional:**

- IEEE Transactions on Cloud Computing

#### **4.9 Organização de Eventos:**

- Schulze, B, et al., Workshop Computação em Clouds e Aplicações (WCGA), 2020
- Schulze, B, et al., Intl. Workshop on Cloud and Edge Computing, and Applications Management (CloudAM), 2020 IEEE Transactions on Cloud Computing

### **5 Atividades Projetadas para 2021**

Continuidade das atividades de pesquisa elencadas neste relatório.

- Submissão do artigo convidado *Em Busca de uma Inteligência Artificial Ecologicamente Viável: Um estudo de caso do Consumo Energético de Algoritmos de Árvore de Decisão* ao periódico Concurrency Practice and Experience.
- Defesa Prevista: Mestrado - LNCC - Gabrieli Dutra Silva. Fev. 2021

### **5.1 Organização de Eventos:**

- Schulze, B, et al., Workshop Computação em Clouds e Aplicações (WCGA), 2021
- Schulze, B, et al., Intl. Workshop on Cloud and Edge Computing, and Applications Management (CloudAM), 2021

### **5.2 Projetos :**

- Chamada FAPERJ Cientista do Nosso Estado
- Início em Fevereiro 2021 do projeto Green AI: Towards an ecologically viable machine learning, aprovado em Dez. 2020, chamada CLIMAT AmSud.



"O conhecimento não se vende."

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



Laboratório  
Nacional de  
Computação  
Científica

UNIDADE DE PESQUISA DO MCTI

MINISTÉRIO DA  
CIÊNCIA, TECNOLOGIA  
E INOVAÇÕES



PÁTRIA AMADA  
**BRASIL**  
GOVERNO FEDERAL