

Ministério da Saúde

FIOCRUZ
Fundação Oswaldo Cruz

Portaria da Coordenação-Geral de Administração

Número
203/2019- COGEAD

Folha
01

De
01

Entrada em vigor
06/12/2019

A Coordenadora Geral de Administração
no uso de suas atribuições,

RESOLVE:

1.0 PROPÓSITO

Designar membros de equipe de planejamento.

Membro da Equipe de Planejamento:


Servidores	Matrícula Siape	Equipe de planejamento
João Hermínio Martins da Silva	1497987	Integrante Requisitante
Bruno Bezerra Carvalho	1913135	Integrante Técnico
Ezequiel Valentim de Melo	4459709	Integrante Administrativo

2.0 OBJETIVO

Aquisição de Computadores de Alto Desempenho para Análise de Dados de Bioinformática e Engenharia de Proteínas para Fiocruz Ceará.

3.0 VIGÊNCIA

A presente Portaria entra em vigor a partir da sua assinatura e terá sua vigência encerrada com a conclusão da fase de Planejamento.

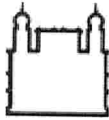

Flavia Silva
Coordenadora-Geral de Administração
FIOCRUZ

Cancela

Altera

Distribuição
Geral

Data
06/12/2019



Ministério da Saúde

FIOCRUZ

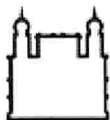
Fundação Oswaldo Cruz

DOCUMENTO DE OFICIALIZAÇÃO DA DEMANDA – DOD

Processo Administrativo nº _____

Aquisição de Computadores de Alto
Desempenho para Análises de Dados de
Bioinformática e Engenharia de Proteínas

Eusébio/CE, 16 de outubro de 2019.



Histórico de Revisões

Data	Versão	Descrição	Autor
16/10/2019	1.0	Elaboração da primeira versão do documento	Bruno Bezerra Carvalho
21/10/2019	1.1	revisão da versão 1.0 do documento	Bruno Bezerra Carvalho
06/11/2019	1.2	Revisão da versão 1.1. do documento	Bruno Bezerra Carvalho
08/11/2019	1.3	Finalização do documento	Bruno Bezerra Carvalho

DOCUMENTO DE OFICIALIZAÇÃO DA DEMANDA – DOD

INTRODUÇÃO

Em conformidade com o art. 10 da Instrução Normativa SGD/ME nº 1, de 4 de abril de 2019, a fase de Planejamento da Contratação terá início com o recebimento do Documento de Oficialização da Demanda pela Área de TIC. Este documento deverá ser elaborado pela Área Requisitante da solução.

Referência: Art. 10 da IN SGD/ME nº 01/2019.

PREENCHIMENTO PELA ÁREA REQUISITANTE

1 – IDENTIFICAÇÃO DA ÁREA REQUISITANTE

Área Requisitante (Unidade/Setor/Depto): FIOCRUZ CEARÁ/BIOTECNOLOGIA

Responsável pela demanda: Carla Freire Celedonio Fernandes

Matrícula/SIAPE: 2175249

E-mail: carla.celedonio@fiocruz.br

Telefone: (85) 3215-6478

2 – IDENTIFICAÇÃO E CIÊNCIA DO INTEGRANTE REQUISITANTE

Nome: João Hermínio Martins da Silva

Matrícula/SIAPE: 1497987

Cargo: Pesquisador em Saúde Pública

Lotação: Presidência/escritório Fiocruz Ceará

E-mail: joao.martins@fiocruz.br

Telefone: (85) 3215-6477

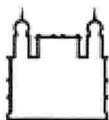
Por este instrumento declaro ter ciência das competências do INTEGRANTE REQUISITANTE definidas na IN SGD/ME nº 1/2019, bem como da minha indicação para exercer esse papel na Equipe de Planejamento da Contratação.

Eusébio/CE, 05 de dezembro de 2019.



João Hermínio Martins da Silva
JOÃO HERMÍNIO MARTINS DA SILVA
Pesquisador Adjunto
Mat. SIAPE 1497987
FIOCRUZ

3 – IDENTIFICAÇÃO DA DEMANDA



Necessidade de Contratação:

Aquisição de Computadores de Alto Desempenho para Análises de Dados de Bioinformática e Engenharia de Proteínas e Identificação e otimização de moléculas com potencial terapêutico para doenças prioritárias para o Ministério da Saúde.

ALINHAMENTO AOS PLANOS ESTRATÉGICOS

ID	Objetivos Estratégicos
N1	Identificação e otimização de moléculas com potencial terapêutico para doenças prioritárias para o Ministério da Saúde.
N2	Maior alinhamento da pesquisa em biotecnologia às demandas do SUS.
N3	Ampliação da capacidade de realização de parcerias e agregação de pesquisadores e formação de novos profissionais (bolsistas alunos de pós-graduação).

ALINHAMENTO AO PDTIC 2019

ID	Ação do PDTIC	ID	Meta do PDTIC associada
A1	8315 - Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico em Saúde	M1	109 - Desenvolvimento Tecnológico em fármacos, biofármacos e medicamentos

ALINHAMENTO AO PAC 2019

Item	Descrição
1	Cód. Item: 456721 – WORKSTATION DE ALTO DESEMPENHO (TIPO I)
2	Cód. Item: 456420 – WORKSTATION DE ALTO DESEMPENHO (TIPO II)

4 – MOTIVAÇÃO/JUSTIFICATIVA

Estes equipamentos destinam-se às atividades de biologia computacional (dinâmica molecular, cálculos de energia, ensaios de desenho de fármacos e modelagem de proteínas e outras biomoléculas). Os algoritmos que serão utilizados nessas máquinas são aplicados por programas específicos para cálculos de alto desempenho. É necessário que o computador seja capaz de lidar com grandes quantidades de matrizes e cálculos complexos, o que gera a necessidade de elevado esforço computacional (milhares de vezes acima das aplicações computacionais de um computador de uso normal), bem como elevadas velocidades de processamento e espaço para armazenagem. Pelo exposto é que o computador de elevado desempenho necessita de configurações especializadas para lidar com os imensos volumes de dados a serem analisados, renderizar estruturas tridimensionais baseadas em modelos complexos e rodar programas científicos específicos (GROMACS, AMBER, NAMD), programas de análise de redes, bem como de criação de modelos tridimensionais relacionados a aplicações de realidade virtual.

Os computadores de alto desempenho serão utilizados nos laboratórios de bioinformática, análise de dados e salas do segundo pavimento do prédio de laboratórios do Campus da Fiocruz no Município do Eusébio, Ceará, unidade Fiocruz Ceará.

Atualmente o grupo de bioinformática é composto por 3 servidores públicos que vem desenvolvendo projetos na área de desenho de fármacos, identificação de alvos moleculares relacionados a doenças, dinâmica molecular de biomoléculas e predição de fenômenos biomoleculares utilizando técnicas computacionais altamente custosas. O grupo tem ainda um pós doutorando vinculado ao Programa Nacional de Pós-Doutorado (PNPD) do programa de biologia computacional, por 5 anos, 6 alunos de doutorado, 5 alunos de mestrado e 7 alunos de iniciação científica que vêm trabalhando nas áreas descritas. Os programas descritos acima necessitam de recursos computacionais avançados para lidar com os algoritmos de dinâmica molecular e cálculos de energias interatômicas em sistemas formados por milhões de partículas. As proteínas alvo são prioritariamente relacionadas a progressão do câncer, em diversas formas, e doenças neurodegenerativas como esclerose múltipla e distrofias musculares. Por se tratar de uma área de ponta em pesquisa biomédica, computadores como os descritos são necessários para que os cálculos tenham poder preditivo eficiente e possam contribuir para a economia em passos posteriores em experimentos laboratoriais.

Diante da grande demanda observada por nosso grupo, fomos obrigados a buscar alternativas para a execução dos projetos de pesquisa e desenvolvimento tecnológico em andamento, de modo que os cronogramas dos envolvidos não fossem impactados. Assim, temos projetos que estão sendo executados em clusters de diversas instituições, tais como o CENAPAD (UFC) e LNCC (Santos Dumont), porém as tarefas nessas instituições dependem da fila de usuários, sob a qual não temos controle. Soma-se a esse fato a constante indisponibilidade de acesso devido a vários fatores, como queda do sinal de internet na Fiocruz Ceará, falta de refrigeração por longos períodos, ocasionando o desligamento da plataforma (CENAPAD), e alta demanda e longas filas de execução (LNCC). A intermitência do sinal de internet é um dos fatores que dificulta a adesão a serviços de processamento baseados em nuvem. Os dados precisam ser acessados em tempo real, e devem estar disponíveis a qualquer momento. Lançamos mão de computadores de outras instituições devido ao gargalo apresentado internamente. Nosso cluster apresenta uma demanda intensa, sendo utilizado 100% do tempo, 24/7 nos projetos internos. Considerando que funcionamos integrados à rede de plataformas da Fiocruz, essa demanda vem aumentando expressivamente, com a prestação de serviços à comunidade externa. Além do mais, diversas análises e cálculos podem e devem ser executados em servidores de menor escala (workstations), alocados diretamente sob controle dos pesquisadores envolvidos, aumentando a disponibilidade do cluster para outros cálculos. Assim, os projetos de pesquisa de doutorandos, mestrandos, pós-doutorandos, graduandos e outros pesquisadores poderão avançar dentro dos cronogramas elaborados. Outras alternativas buscadas também envolvem a nuvem FIOCRUZ, que não apresente poder de processamento adequado para os cálculos intensivos de dinâmica molecular exigidos em nossas aplicações. Os algoritmos de dinâmica molecular e cálculos de energia livre mostram um desempenho muito superior quando executados em GPU do tipo especificado no termo de referência, apresentando um ganho médio de mais de 50% em nano segundos/dia, de acordo com os desenvolvedores do programa GROMACS, utilizado em nosso grupo. Outros programas, como o AMBER, também utilizado em nosso grupo, se aproveitam de GPUs, aumentando expressivamente o desempenho dos cálculos, quando executados nessa arquitetura.

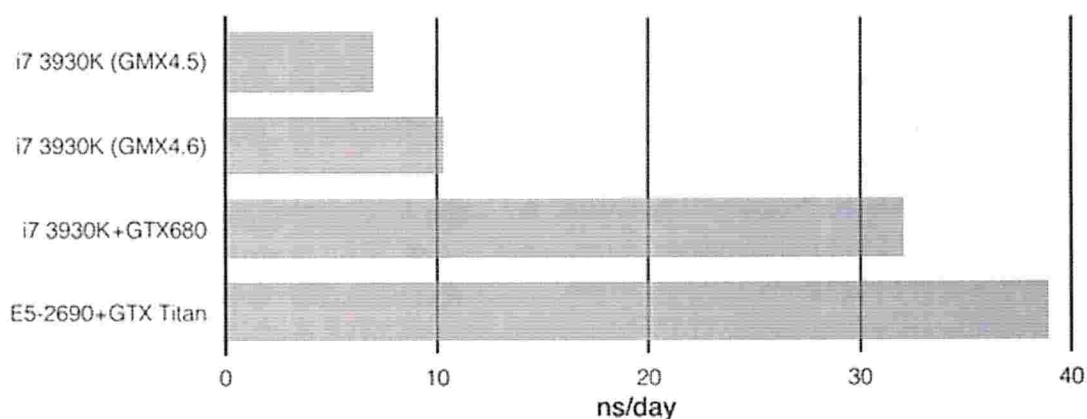


Figure 1: Fonte: http://www.gromacs.org/GPU_acceleration

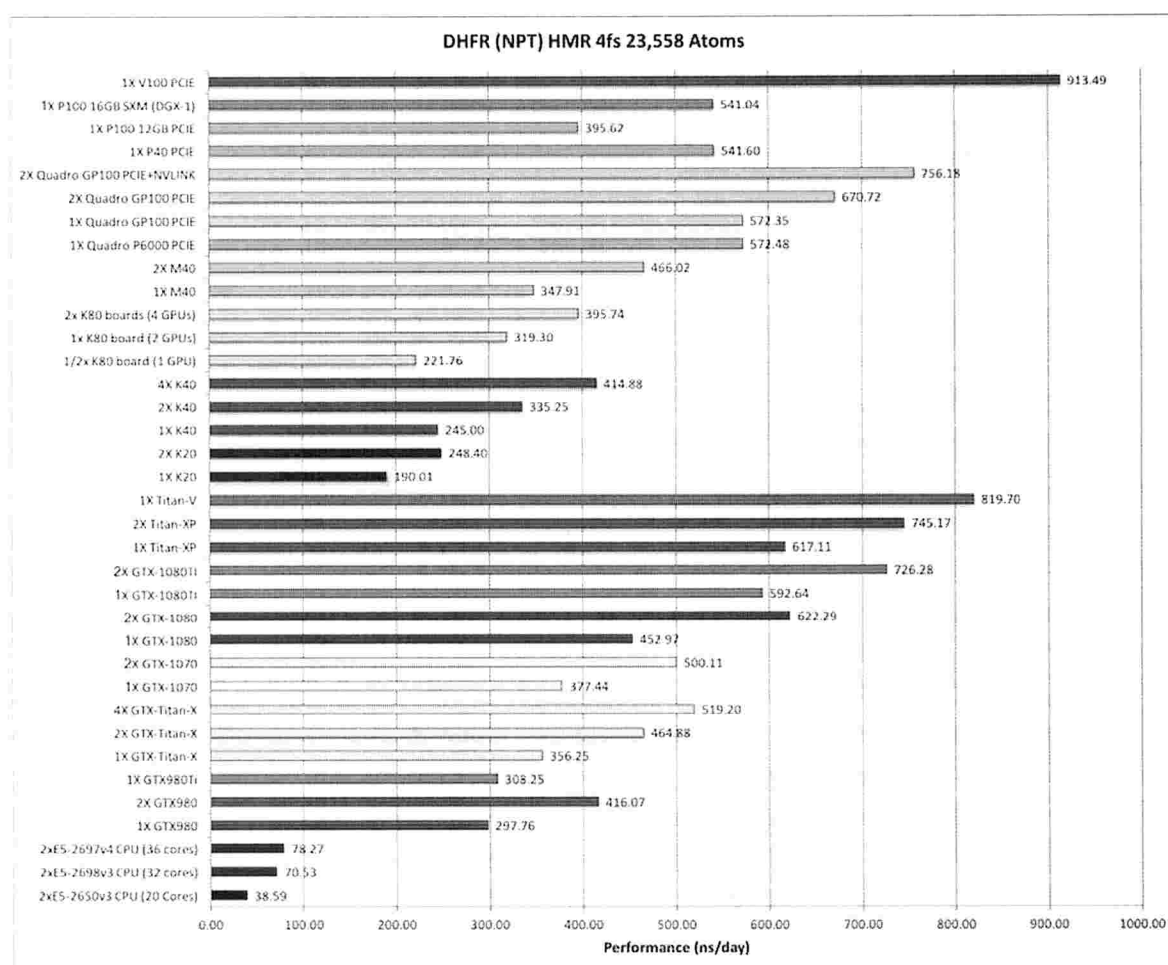


Figure 2: Fonte: <http://ambermd.org/qpus16/benchmarks.htm>

Diante do exposto, justifica-se a aquisição das workstations especificadas, proporcionando condições adequadas para responder às demandas advindas do Ministério da Saúde e outros parceiros. Cabe ainda ressaltar que o grupo vem mantendo sua produtividade e aceitando novos alunos, principalmente oriundos de cursos de pós-graduação vinculados a Fiocruz, UFC e Rede Nordeste de Biotecnologia. Em maio de 2019 iniciamos uma turma de Doutorado composta por 12

alunos, com projetos interdisciplinares nas áreas de atuação da Fiocruz Ceará, incluindo-se nessas temáticas a Bioinformática.

5 – RESULTADOS A SEREM ALCANÇADOS COM A CONTRATAÇÃO

Com a execução do projeto, teremos os seguintes benefícios:

- Fortalecer e estruturar a formação de recursos humanos na área da Biotecnologia e Saúde;
- Rediscutir, fortalecer e ampliar as plataformas de desenvolvimento – Bioinformática, bioprospecção de moléculas, engenharia de anticorpos, epidemiologia e nanotecnologia;
- Estruturar e consolidar cooperações técnico-científicas na área de Biotecnologia;
- Maior aderência ao planejamento estratégico;
- Aumento do poder computacional da unidade;
- Atualização de uma plataforma tecnológica estratégica.

6 – FONTE DE RECURSOS

A contratação está alinhada ao PDTI, cujo investimento está previsto no SAGE de 2018/2019 da Fiocruz Ceará dentro do projeto 2015.8315.109.25564.

Ação Orçamentária: 8315 - Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico em Saúde

Título: BIO Aquisição de Computadores de Alto Desempenho para Análises de Dados de Bioinformática e Engenharia de Proteínas.

Código Projeto: 2015.8315.109.25564

Descrição: Aquisição de Computadores de Alto Desempenho para Análises de Dados de Bioinformática e Engenharia de Proteínas.

Finalidade da Ação: 109 - Desenvolvimento Tecnológico em fármacos, biofármacos e medicamentos
UGR: 254487

Fonte de recursos:

Programa de trabalho: 10571201583150001 - PESQUISA E DESENVOLVIMENTO TECNOLÓGICO

Natureza da Despesa: 449052

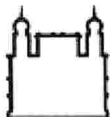
ENCAMINHAMENTO

Encaminha-se ao Geraldo Sorte, Coordenador-Geral de Tecnologia da Informação e Comunicação, para providências.

Eusébio/CE, 05 de dezembro de 20 19.


João Hermínio Martins da Silva

JOÃO HERMINIO MARTINS DA SILVA
Pesquisador Adjunto
Mat. SIAPE 1497987
FIOCRUZ

**PREENCHIMENTO PELA ÁREA DE TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO****7 – IDENTIFICAÇÃO E CIÊNCIA DO INTEGRANTE TÉCNICO**

Nome: Bruno Bezerra Carvalho	Matrícula/SIAPE: 1913135
Cargo: Analista de Gestão em Saúde Pública	Lotação: Presidência/Fiocruz Ceará
E-mail: bruno.carvalho@fiocruz.br	Telefone: (85) 3215-6452

Por este instrumento declaro ter ciência das competências do INTEGRANTE TÉCNICO definidas na IN SGD/ME nº 1/2019, bem como da minha indicação para exercer esse papel na Equipe de Planejamento da Contratação.

Eusébio/CE, 05 de dezembro de 2019.

Bruno Bezerra Carvalho

ENCAMINHAMENTO

Encaminhe-se à autoridade competente da Área Administrativa, que deverá:

- I. Decidir motivadamente sobre o prosseguimento da contratação;
- II. Indicar o Integrante Administrativo para composição da Equipe de Planejamento da Contratação, quando da continuidade da contratação; e
- III. Instituir a Equipe de Planejamento da Contratação, conforme exposto no inciso IV do art. 2º, e inciso III do §2º do art. 10.

Eusébio/CE, 05 de dezembro de 2019.

Bruno Bezerra Carvalho

PREENCHIMENTO PELA ÁREA ADMINISTRATIVA

8 – DECISÃO DA AUTORIDADE COMPETENTE

A Fiocruz-CE é âncora tecnológica do Polo Industrial e Tecnológico da Saúde (PITS). A Fiocruz-CE está fazendo parcerias com o Banco do Nordeste (BNB) e Secretária de Saúde do estado (SESA) do Ceará para executar projetos conjuntos. Projeta-se também que a Fiocruz-CE fará colaboração com empresas locais, nacionais e internacionais e precisa manter um parque de equipamentos de informática, otimizado para uso em pesquisas em Bioinformática, que são temas de projetos com BNB e SESA-Ceará. As atividades de bioinformática estrutural já estão sendo executadas com a presença de três pesquisadores em computação científica aplicada a evolução de proteínas *in silico*, como etapa inicial para proposição de novos biofármacos. O grupo de estudantes e profissionais somados a esses três pesquisadores chegam a 25 profissionais, que se beneficiarão com a aquisição. Os projetos são majoritariamente em desenvolvimento de anticorpos (projeto INOVA da Fiocruz aprovado) de terapia celular para o câncer e (em conjunto com a SESA), também, enzima L-asparaginase humana para combate a Leucemia (BNB). A Fiocruz vem mantendo, desde 2013, uma plataforma tecnológica definida por um Cluster do tipo HPC e outras estações de trabalhos para precisam ser atualizadas e incrementadas para dar continuidade aos trabalhos de pesquisa. Portanto torna-se necessária uma atualização/reparo/incremento dos equipamentos (estações de trabalho), através da aquisição de materiais de informática para garantir o processamento e armazenamento de dados. Dessa forma, a unidade vai conseguir se dedicar, com a devida qualidade, no pré-desenvolvimento e desenvolvimento de biofármacos, entregando os resultados previstos e acordados nos projetos fomentados pelos parceiros e para a sociedade.

9 – IDENTIFICAÇÃO E CIÊNCIA DO INTEGRANTE ADMINISTRATIVO

Nome: Ezequiel Valentim de Melo	Matrícula/SIAPE: 4459709
Cargo: Analista de Gestão em Saúde Pública	Lotação: Presidência/Fiocruz Ceará
E-mail: ezequiel.melo@fiocruz.br	Telefone: (85) 3215-6450

Por este instrumento declaro ter ciência das competências do INTEGRANTE ADMINISTRATIVO definidas na IN SGD/ME nº 1/2019, bem como da minha indicação para exercer esse papel na Equipe de Planejamento da Contratação.

Eusébio/CE, 05 de Agosto de 2019.

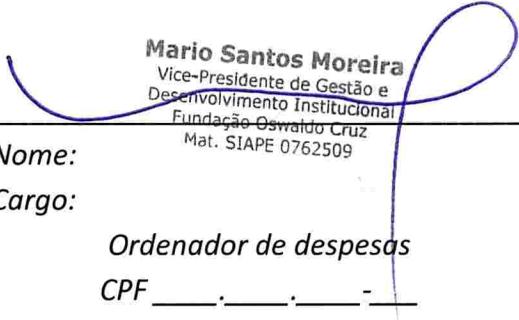

Ezequiel Valentim de Melo

EZEQUIEL VALENTIM DE MELO
Mat. SIAPE 4459709
FIOCRUZ

Fica instituída a Equipe de Planejamento da Contratação, conforme dispõe o inciso IV do art. 2º e o inciso III do § 2º do art. 10, da IN SGD/ME nº 01/2019.

Conforme o art. 29, § 8º da IN SGD/ME nº 01/2019, a Equipe de Planejamento da Contratação será automaticamente destituída quando da assinatura do contrato.

Rio de Janeiro/RJ, 05 de dezembro de 2019.


Mario Santos Moreira
Vice-Presidente de Gestão e
Desenvolvimento Institucional
Fundação Oswaldo Cruz
Mat. SIAPE 0762509

Nome: _____
Cargo: _____
Ordenador de despesas
CPF _____
Matrícula/SIAPE: _____