

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

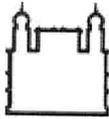
Cancela

Altera

Distribuição  
Geral

Data  
06/12/2019





Ministério da Saúde

**FIOCRUZ**

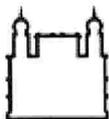
Fundação Oswaldo Cruz

# **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

<b>Data</b>	<b>Versão</b>	<b>Descrição</b>	<b>Autor</b>
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

<b>Responsável pela demanda:</b> Carla Freire Celedonio Fernandes	<b>Matrícula/SIAPE:</b> 2175249
<b>E-mail:</b> carla.celedonio@fiocruz.br	<b>Telefone:</b> (85) 3215-6478

#### 2 – IDENTIFICAÇÃO E CIÊNCIA DO INTEGRANTE REQUISITANTE

<b>Nome:</b> João Hermínio Martins da Silva	<b>Matrícula/SIAPE:</b> 1497987
<b>Cargo:</b> Pesquisador em Saúde Pública	<b>Lotação:</b> Presidência/escritório Fiocruz Ceará
<b>E-mail:</b> joao.martins@fiocruz.br	<b>Telefone:</b> (85) 3215-6477

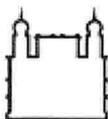
Por este instrumento declaro ter ciência das competências do INTEGRANTE REQUISITANTE definidas na IN SGD/ME nº 1/2019, bem como da minha indicação para exercer esse papel na Equipe de Planejamento da Contratação.

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.

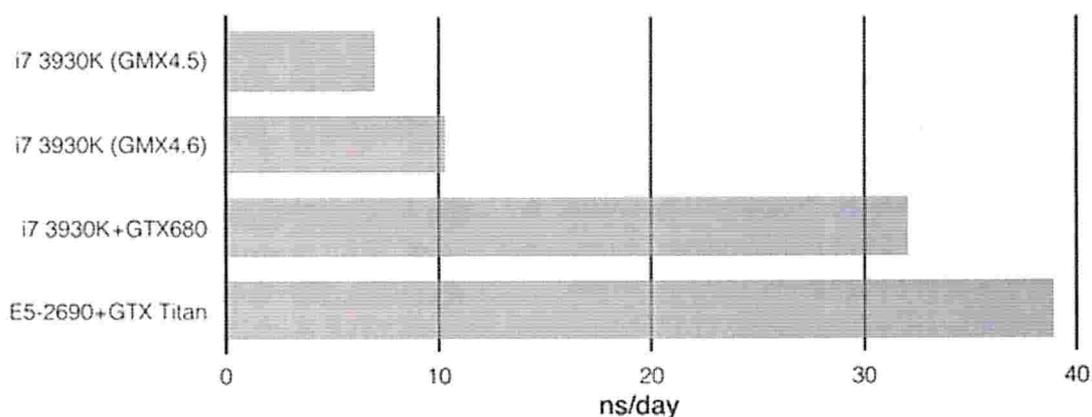


Figure 1: Fonte: [http://www.gromacs.org/GPU\\_acceleration](http://www.gromacs.org/GPU_acceleration)

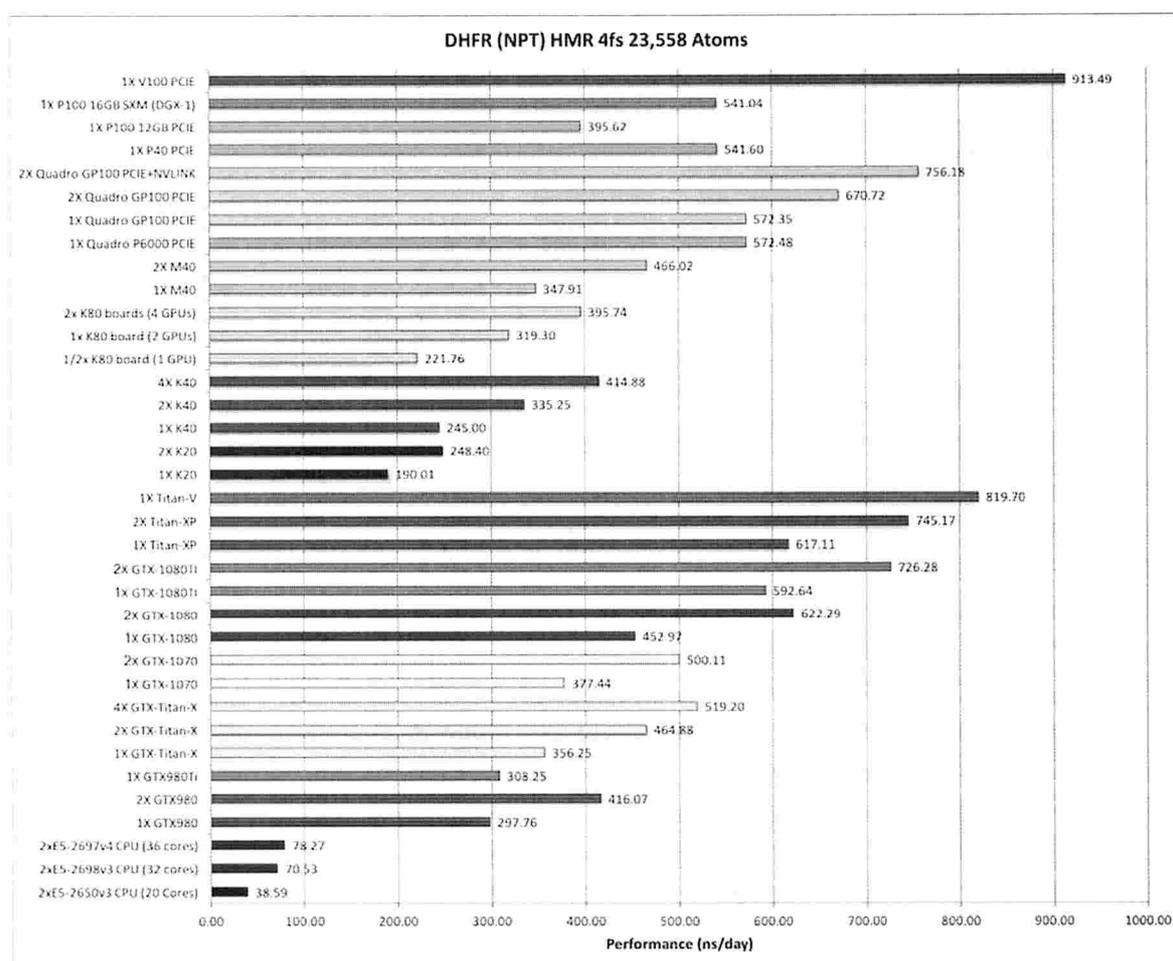


Figure 2: Fonte: <http://ambermd.org/qpus16/benchmarks.htm>

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

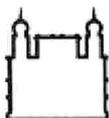
## ENCAMINHAMENTO

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**

<b>Nome:</b> Bruno Bezerra Carvalho	<b>Matrícula/SIAPE:</b> 1913135
<b>Cargo:</b> Analista de Gestão em Saúde Pública	<b>Lotação:</b> Presidência/Fiocruz Ceará
<b>E-mail:</b> bruno.carvalho@fiocruz.br	<b>Telefone:</b> (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 dezenho 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 dezenho 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

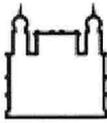
<b>Nome:</b> Ezequiel Valentim de Melo	<b>Matrícula/SIAPE:</b> 4459709
<b>Cargo:</b> Analista de Gestão em Saúde Pública	<b>Lotação:</b> Presidência/Fiocruz Ceará
<b>E-mail:</b> ezequiel.melo@fiocruz.br	<b>Telefone:</b> (85) 3215-6450

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: \_\_\_\_\_