

PLANO DIRETOR
LNCC
2023-2027

PRESIDENTE DA REPÚBLICA
Jair Messias Bolsonaro

MINISTRO DE CIÊNCIA, TECNOLOGIA E INOVAÇÕES
Paulo César Rezende de Carvalho Alvim

SECRETÁRIO EXECUTIVO - MCTI
Sergio Freitas de Almeida

SUBSECRETÁRIO DAS UNIDADES VINCULADAS - SUV/ MCTI
Aléx Fabiano Ribeiro de Magalhães

COORDENADOR-GERAL DE UNIDADES DE PESQUISA E ORGANIZAÇÕES SOCIAIS -
CGPS/ MCTI
César Augusto Rodrigues do Carmo

COORDENADOR DE UNIDADES DE PESQUISA - COUPE/ MCTI
Higor Thales Rocha Lopes

DIRETOR DO LABORATÓRIO NACIONAL DE COMPUTAÇÃO CIENTÍFICA - LNCC
Fábio Borges de Oliveira

COORDENADOR DE MÉTODOS MATEMÁTICOS E COMPUTACIONAIS - COMAC
Pablo Javier Blanco - substituto

COORDENADOR DE MODELAGEM COMPUTACIONAL - COMOD
Laurent Emmanuel Dardenne

COORDENADORA DE PÓS-GRADUAÇÃO E APERFEIÇOAMENTO - COPGA
Sandra Mara Cardoso Malta

COORDENADOR DE TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO E COMUNICAÇÃO - COTIC
Wagner Vieira Léo

COORDENADOR DE GESTÃO E ADMINISTRAÇÃO - COGEA
Sergio Ferreira de Figueiredo

Este Plano Diretor da Unidade (PDU) para o período 2023-2027 foi preparado pelo Conselho de Pesquisa e de Formação de Recursos Humanos (CPFRH) e aprovado pelo Comitê Técnico-Científico (CTC) no dia 09 de dezembro de 2022.

CPFRH

Fábio Borges de Oliveira
Pablo Javier Blanco
Laurent Emmanuel Dardenne
Antônio André Novotny
Marcio Arab Murad
Sandra Mara Cardoso Malta
Wagner Vieira Léo
Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos

CTC

Fábio Borges de Oliveira - LNCC
Marcelo Dutra Fragoso - LNCC
Frederic Gerard Christian Valentin - LNCC - suplente
Marcio Arab Murad - LNCC
Ana Tereza Ribeiro de Vasconcelos - LNCC - suplente
Abimael Fernando Dourado Loula - LNCC
Alexandre Loureiro Madureira - LNCC - suplente
Moacyr Martucci Junior - USP
Celso da Cruz Carneiro Ribeiro - UFF - suplente
Lisandro Zambenedetti Granville - UFRGS
Raimundo José de Araújo Macêdo - UFBA - suplente
Nivio Ziviani - UFMG
Fernando Alves Rochinha - UFRJ - suplente
Paulo Roberto Freire Cunha - UEPE
Celina Miraglia Herrera de Figueiredo - UFRJ - suplente
José Roberto Boisson de Marca - CETUC
Richard Charles Garratt - USP - suplente

Agradecimentos

Agradecimentos especiais a Miriam Barbuda Fernandes Chaves, pelo apoio técnico, e a Mariana de Carvalho Rocha, pela diagramação do PDU 2023-2027.

Edição 2022

LNCC - Laboratório Nacional de Computação Científica
Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha - Petrópolis - RJ

Sumário

1	Apresentação	13
2	Finalidade e Competência	13
3	Histórico da Atuação	15
4	Missão	19
5	Visão de Futuro e Objetivos Estratégicos	19
6	Valores e Princípios	22
7	Cenários	23
7.1	Infraestrutura de HPC	23
7.2	Orçamento	24
7.3	Marco Legal	25
7.4	Recursos Humanos	25
8	Ações e Programas	27
8.1	Linha de Ação de Pesquisa e Desenvolvimento	27
8.2	Linha de Ação de Serviços de Computação de Alto Desempenho - HPC . .	33
8.3	Linha de Ação de Formação de Recursos Humanos	34
8.3.1	Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC (PPG-LNCC)	34
8.3.2	Divulgação Científica	36
9	Macroprocessos, Entregas e Avaliação	36
10	Macroprocessos Finalísticos	36
10.1	Realizar Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação - PD&I	36
10.2	Difundir Ciência, Tecnologia e Inovação - CT&I	40
10.3	Formar Mestres e Doutores em Modelagem Computacional	41
10.4	Prover Plataforma Computacional de Alto Desempenho	43
10.5	Pesquisar, Analisar e Sequenciar Genomas	45
10.6	Gestão de PI e Transferência Tecnológica - NIT-Rio	46
10.7	Incubação de Empresas	47
11	Demais Macroprocessos	47
12	Acompanhamento e Revisão	48

Lista de Acrônimos

- ABC** Academia Brasileira de Ciências. 18
- ABCM** Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas. 35
- ABMEC** Associação Brasileira de Métodos Computacionais em Engenharia. 35
- ACiMA** Laboratório de Ambientes Colaborativos e Multimídia Aplicada. 15
- ACT** Recursos Financeiros Aplicados em Capacitação e Treinamento. 47, 48
- AGU** Advocacia-Geral da União. 25
- ANE** Academia Nacional de Engenharia. 18
- ASTOP** Análise de Sensibilidade Topológica. 15
-
- BAMC** Biologia Aplicada à Modelagem Matemática e Computacional. 15
- BSC** *Barcelona Supercomputing Center*. 34
-
- CAPES** Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior. 35, 41
- CATI** Comitê da Área de Tecnologia da Informação. 47
- CEA** *Commissariat a l'Energie Atomique*. 34
- CENAPAD-RJ** Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho no Rio de Janeiro. 33
- CERNE** Centro de Referência para Apoio a Novos Empreendimentos. 47
- CGU** Controladoria-Geral da União. 25
- CJU** Consultoria Jurídica da União. 25
- CNPq** Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. 15, 18, 35
- COGEA** Coordenação de Gestão e Administração. 2
- COMAC** Coordenação de Métodos Matemáticos e Computacionais. 2, 15
- ComCiDis** Computação Científica Distribuída. 15
- COMOD** Coordenação de Modelagem Computacional. 2, 15
- COMOPORE** *Computational Modeling of Porous Materials*. 15
- COPGA** Coordenação de Pós-Graduação e Aperfeiçoamento. 2
- COTIC** Coordenação de Tecnologia da Informação e Comunicação. 2, 15
- COVID-19** *Coronavirus disease 2019*. 18, 30, 31, 34, 45
- CPFRH** Conselho de Pesquisa e de Formação de Recursos Humanos. 3, 48
- CT&I** Ciência, Tecnologia e Inovação. 9, 11, 12, 22, 30, 33, 41
- CTC** Comitê Técnico-Científico. 3, 48
-
- DDMC** Doutorado Multi-institucional e Multidisciplinar em Difusão do Conhecimento.

- DEXL** *Data Extreme Lab*. 15
- DiPC** Disponibilidade da Plataforma Computacional. 45
- EMBRAPII** Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial. 20, 24
- ENCTI** Estratégia Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação. 22
- ESDA** Estabilização de Sistemas Dinâmicos e Aplicações. 15
- FACC** Fundação de Apoio ao Desenvolvimento da Computação Científica. 16
- FAPERJ** Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro. 30, 47
- FDA** *Food and Drug Administration*. 31
- FIOCRUZ** Fundação Oswaldo Cruz. 35, 42
- FNDCT** Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico. 33
- GANs** *Generative Adversarial Networks*. 31
- GCON** Grupo de Sistemas e Controle. 15
- GCQC** Grupo de Computação Quântica e Criptografia. 15
- GMMSB** Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos. 15
- HeMoLab** Laboratório de Modelagem em Hemodinâmica. 15
- HPC** *High Performance Computing*. 7, 8, 11, 12, 16, 23, 30, 33, 44, 45
- IA** Inteligência Artificial. 16, 19, 22, 27, 28, 30, 31, 33, 35
- IBM** *International Business Machines*. 35
- ICT** Instituto de Ciência e Tecnologia. 13, 25, 47
- IEEE** *Institute of Electrical and Electronics Engineers*. 18
- IEO** Índice de Execução Orçamentária. 47
- IEPCI** Índice de Execução dos Recursos do Programa de Capacitação Institucional. 47
- IFAC** *International Federation of Automatic Control*. 18
- IFBA** Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Bahia. 42
- INCT** Institutos Nacionais de Ciência e Tecnologia. 18
- Inmetro** Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia. 35, 42
- IO** Índice de Ocupação da Plataforma *High Performance Computing*. 45
- IODT** Índice de Orientação de Dissertações e Teses Defendidas. 43
- IPCI** Índice de Bolsistas de Programa de Capacitação Institucional. 48
- IPES** *Innovative Parallel Finite Element Solvers*. 15

IPUB Índice de Publicações. 40

LABINFO Laboratório de Bioinformática. 11, 15, 16, 18, 30, 45, 46

LBNL *Lawrence Berkeley National Laboratory*. 34

LEA Limite de Empenho do Orçamento Autorizado. 47

LNCC Laboratório Nacional de Computação Científica. 2, 3, 11–20, 22–29, 31–37, 39–43, 45–48

LNLS Laboratório Nacional de Luz Síncrotron. 34

LOA Lei Orçamentária Anual. 9, 24, 47

MACC Medicina Assistida por Computação Científica. 18

MCTI Ministério de Ciência, Tecnologia e Inovações. 2, 11–14, 16, 18, 20–22, 25, 26, 30, 33, 34, 36, 43

MCTIC Ministério de Comunicações, Tecnologia, Inovações e Comunicações. 13

MDA Metaheurísticas, Desenho e Aplicações. 15

MIE Modelagem de Incertezas Epistêmicas. 15

NCC Número de Certificados Concedidos. 41

NCEC Número de Certificados em Eventos Científicos. 41

NCSA *National Center for Supercomputing Applications*. 34

NDM Número de Dissertações de Mestrado. 43

NDT Número de Teses de Doutorado. 43

NGA Número de Genomas Analisados. 46

NGS Número de Genoma Sequenciados. 46

NgS *Next-generation Sequencing*. 30

NHD Número de Horas Disponíveis da Plataforma Computacional. 45

NHP Número de Horas de Disponibilidade Prevista da Plataforma Computacional. 45

NIT-Rio Núcleo de Inovação Tecnológica. 16, 20, 46

NOD Número de Membros do Corpo Docente Habilitados a Orientar Teses de Doutorado. 43

NOM Número de Membros do Corpo Docente Habilitados a Orientar Somente Dissertações de Mestrado. 43

NPAe Número de Projetos Utilizando *High Performance Computing*. 45

NPSCI Número de Publicações em Periódicos com ISSN e Indexados nas Bases WoS/SCI e SCOPUS. 40

NPT Número de Pessoal Terceirizado. 48

NTB Número Total de Bolsistas. 48

NTP Número de Artigos, publicados ou aceitos, gerados de Teses e Dissertações. 43

NTPUB Índice de Produtividade de Publicações por Autores. 40

NTS Número Total de Servidores. 48

NUMA Análise Numérica e Aplicações. 15

OCC Dotação Orçamentária Aprovada na Lei Orçamentária Anual. 9, 47

PAD Processamento de Alto Desempenho. 15

PCI Programa de Capacitação Institucional. 7, 47, 48

PD Número de Pós-doutorandos. 43

PD&I Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação. 11–13, 15, 19, 22, 24, 25, 36, 38, 40

PDTIC Plano Diretor de Tecnologia da Informação e Comunicação. 20

PDU Plano Diretor da Unidade. 3, 4, 13, 24, 48

PEP Participantes em Eventos de Popularização de Ciência, Tecnologia e Inovação. 41

PIVC Grupo de Pesquisa em Processamento de Imagens e Visualização Científica. 15

PPCI Programas e Projetos de Cooperação Internacional. 40

PPCN Programas e Projetos de Cooperação Nacional. 40

PPD Projetos de Pesquisa Desenvolvidos. 40

PPG-LNCC Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC. 34–36, 42

PRB Participação Relativa de Bolsistas. 48

PROJ Total de Projetos Desenvolvidos. 40

PRONEX Programa de Apoio a Núcleos de Excelência. 18

PRPT Participação Relativa de Pessoal Terceirizado. 48

RE Receita Extraorçamentária. 47

RISC Rede Interativa de Pesquisa e Pós-Graduação em Conhecimento e Sociedade. 42

RREO Relação entre Receita Própria, Extraorçamentária e Dotação Orçamentária Aprovada na Lei Orçamentária Anual. 47

SADC Softwares Aplicativos Disponíveis à Comunidade. 45

SAE Secretaria de Assuntos Estratégicos. 35

SARS-CoV-2 SARS-CoV-2. 30, 31

SBC Sociedade Brasileira de Computação. 35

SBMAC Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional. 35

SCP Segurança Cibernética e Privacidade. 15

SDSC *San Diego Supercomputer Center*. 34

SDumont Supercomputador Santos Dumont. 11, 16, 19, 23, 24, 28, 30, 31, 33, 34, 43, 44

SECIN Serviço de Comunicação Institucional. 36

SECTI-RJ Secretaria de Ciência, Tecnologia e Inovação do Estado do Rio de Janeiro. 35

SENAI CIMATEC SENAI CIMATEC. 42

SINAPAD Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho. 16, 33, 34

SNCT Semana Nacional de Ciência e Tecnologia. 36

TACC *Texas Advanced Computing Center*. 34

TCG Termo de Compromisso de Gestão. 12, 36, 40–48

TCU Tribunal de Contas da União. 25, 43

TMG Modelagem Computacional do Crescimento Tumoral. 15

TNSE Técnicos de Nível Superior Vinculados à Pesquisa. 40

TPER Total de Projetos de P&D Envolvendo Redes Temáticas. 40

TPTD Trabalhos Publicados por Teses e Dissertações Defendidas. 43

UE União Europeia. 34

UEFS Universidade Estadual de Feira de Santana. 42

UFRJ Universidade Federal do Rio de Janeiro. 3, 35

UGCDEFA Unidade de Genômica Computacional “Darcy Fontoura de Almeida”. 16, 30

UNEB Universidade do Estado da Bahia. 42

UPC Unidade de Plataforma Computacional. 45

VOE Recursos de Custeio e Capital Provenientes do Tesouro Nacional. 47

Lista de Figuras

1	Organograma do Laboratório Nacional de Computação Científica (LNCC) - Portaria Ministério de Ciência, Tecnologia e Inovações (MCTI) nº 3.454/2020.	14
2	Marcos históricos do LNCC.	17
3	Mapa Estratégico MCTI 2020-2023.	21
4	Evolução do SDumont na lista TOP500.	24
5	Orçamento anual, em milhões.	25
6	Recursos humanos.	26
7	Cadeia de valor do LNCC - Macroprocessos.	37
8	Projetos de Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação (PD&I).	38
9	Projetos por pesquisador.	38
10	Artigos por pesquisador.	39
11	Áreas de publicações do LNCC.	39
12	Participantes em eventos de difusão de Ciência, Tecnologia e Inovação (CT&I).	41
13	Índice de publicações relacionadas a teses e dissertações.	42
14	Número de projetos de <i>High Performance Computing</i> (HPC)	44
15	Tempo disponível do Supercomputador Santos Dumont (SDumont).	44
16	Genomas analisados pelo Laboratório de Bioinformática (LABINFO).	46
17	Genomas sequenciados pelo LABINFO.	46

Lista de Tabelas

1	Grupos de pesquisa.	15
2	Áreas de PD&I - Portaria MCTI nº 5.109/2021.	22
3	Recursos humanos do LNCC.	26
4	Indicadores de PD&I conforme o Termo de Compromisso de Gestão (TCG) 2022.	40
5	Indicadores de difusão de CT&I conforme o TCG 2022.	41
6	Indicadores de pós-graduação conforme o TCG 2022.	43
7	Indicadores de HPC conforme o TCG 2022.	45
8	Indicadores de bioinformática conforme o TCG 2022.	46
9	Indicadores de outros macroprocessos do LNCC conforme TCG 2022. . . .	47

1 Apresentação

Este Plano Diretor da Unidade (PDU) estabelece as diretrizes estratégicas para o LNCC no período de 2023 a 2027 em conformidade com o Planejamento Estratégico Institucional do MCTI, conforme Portaria MCTI n° 5.695, de 16 de março de 2022, que institui o planejamento estratégico do MCTI. O LNCC é um Instituto de Ciência e Tecnologia (ICT) do MCTI. Inaugurado em 1980 e que desde 1998 fica localizado em Petrópolis, na região serrana do Rio de Janeiro, ocupando uma área construída de 10.640 m².

A partir de 1º de janeiro de 2023, este PDU substitui o PDU 2018-2022.

2 Finalidade e Competência

O Decreto n° 10.463/2020, que trata da estrutura regimental do MCTI, atribui ao LNCC as seguintes competências em seu art. 39:

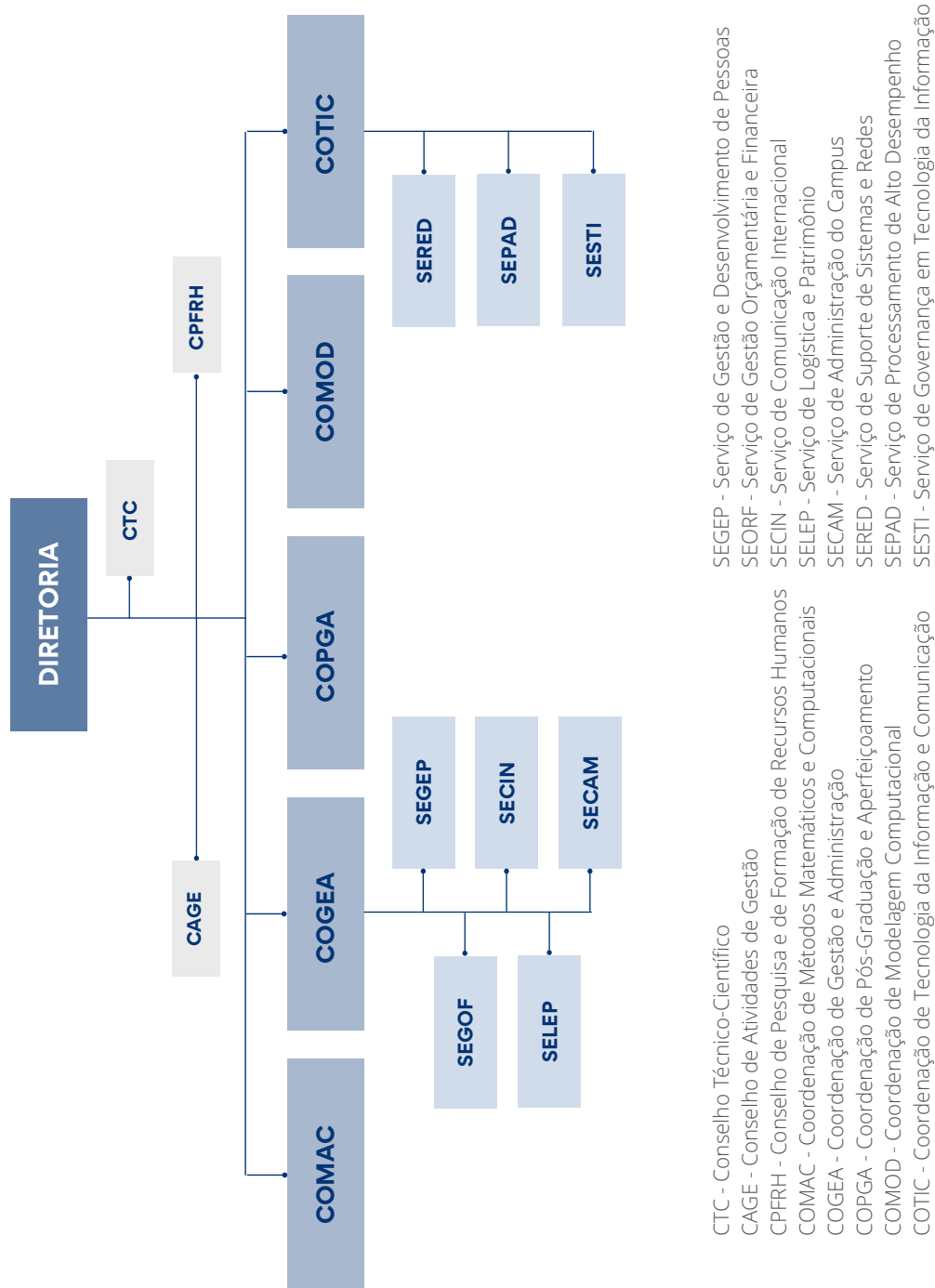
- i. realizar pesquisa e desenvolvimento em computação científica, em especial a criação e a aplicação de modelos e métodos matemáticos e computacionais na solução de problemas científicos e tecnológicos;
- ii. desenvolver e gerenciar ambiente computacional de alto desempenho que atenda às necessidades do País; e
- iii. formar recursos humanos, promovendo transferência de tecnologia e inovação.

Os principais marcos legais que se aplicam às atividades do LNCC são:

- Lei n° 10.973, de 2 de dezembro de 2004, denominada “Lei de Inovação”, que foi alterada pelo Marco Legal da Ciência, Tecnologia e Inovação, Lei n° 13.243, de 11 de janeiro de 2016;
- Lei n° 8.958, de 20 de dezembro de 1994, que estabelece as normas para utilização das fundações de apoio a instituições de pesquisa.
- Decreto n° 10.463, de 14 de agosto de 2020 e Portaria MCTI n° 3.410, de 10 de setembro de 2020, que tratam da estrutura regimental do MCTI;
- Portaria MCTIC n° 3.454, de 10 de setembro de 2020, que trata do Regimento Interno do LNCC;
- Portaria MCTIC n° 5.109, de 16 de agosto de 2021, que define as prioridades de projetos de PD&I;
- Portaria MCTI n° 5.695, de 16 de março de 2022, que institui o planejamento estratégico do MCTI.

O organograma atual do LNCC, conforme regimento interno, está organizado entre áreas finalísticas e áreas meio, veja Figura 1.

Figura 1: Organograma do LNCC - Portaria MCTI nº 3.454/2020.



Os grupos de pesquisa se dividem entre as coordenações Coordenação de Métodos Matemáticos e Computacionais (COMAC), Coordenação de Modelagem Computacional (COMOD) e Coordenação de Tecnologia da Informação e Comunicação (COTIC), conforme Tabela 1.

Tabela 1: Grupos de pesquisa.

Coordenação	Grupos de pesquisa
COMAC	ComCiDis - Computação Científica Distribuída PIVC - Grupo de Pesquisa em Processamento de Imagens e Visualização Científica ACiMA - Laboratório de Ambientes Colaborativos e Multimídia Aplicada DEXL - <i>Data Extreme Lab</i> GCQC - Grupo de Computação Quântica e Criptografia ASTOP - Análise de Sensibilidade Topológica NUMA - Análise Numérica e Aplicações IPES - <i>Innovative Parallel Finite Element Solvers</i> HeMoLab - Laboratório de Modelagem em Hemodinâmica ESDA - Estabilização de Sistemas Dinâmicos e Aplicações GCON - Grupo de Sistemas e Controle
COMOD	MDA - Metaheurísticas, Desenho e Aplicações GMMSB - Grupo de Modelagem Molecular de Sistemas Biológicos COMOPORE - <i>Computational Modeling of Porous Materials</i> MIE - Modelagem de Incertezas Epistêmicas BAMC - Biologia Aplicada à Modelagem Matemática e Computacional TMG - Modelagem Computacional do Crescimento Tumoral LABINFO - Laboratório de Bioinformática
COTIC	PAD - Processamento de Alto Desempenho SCP - Segurança Cibernética e Privacidade

3 Histórico da Atuação

Em maio de 1980, o LNCC foi criado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), com as missões de realizar PD&I de caráter multidisciplinar com ênfase em métodos de modelagem matemática e computacional e a de dar suporte

a projetos científicos de outras instituições e de empresas, por meio de sua plataforma de HPC.

Uma nova missão foi agregada com a criação do programa de pós-graduação em Modelagem Computacional no ano 2000. Deste modo, o Laboratório passou a contribuir diretamente na formação de pesquisadores com elevado grau de qualificação e com perfil interdisciplinar.

Em 2001, o LNCC também passou a atuar na promoção da inovação e empreendedorismo através da sua Incubadora. Implantou a Fundação de Apoio ao Desenvolvimento da Computação Científica (FACC) – que hoje apoia projetos de pesquisa em todas as Unidades de Pesquisa do MCTI no Rio de Janeiro, e está vinculado ao Núcleo de Inovação Tecnológica (NIT-Rio) – assim como outras Unidades de Pesquisa do MCTI.

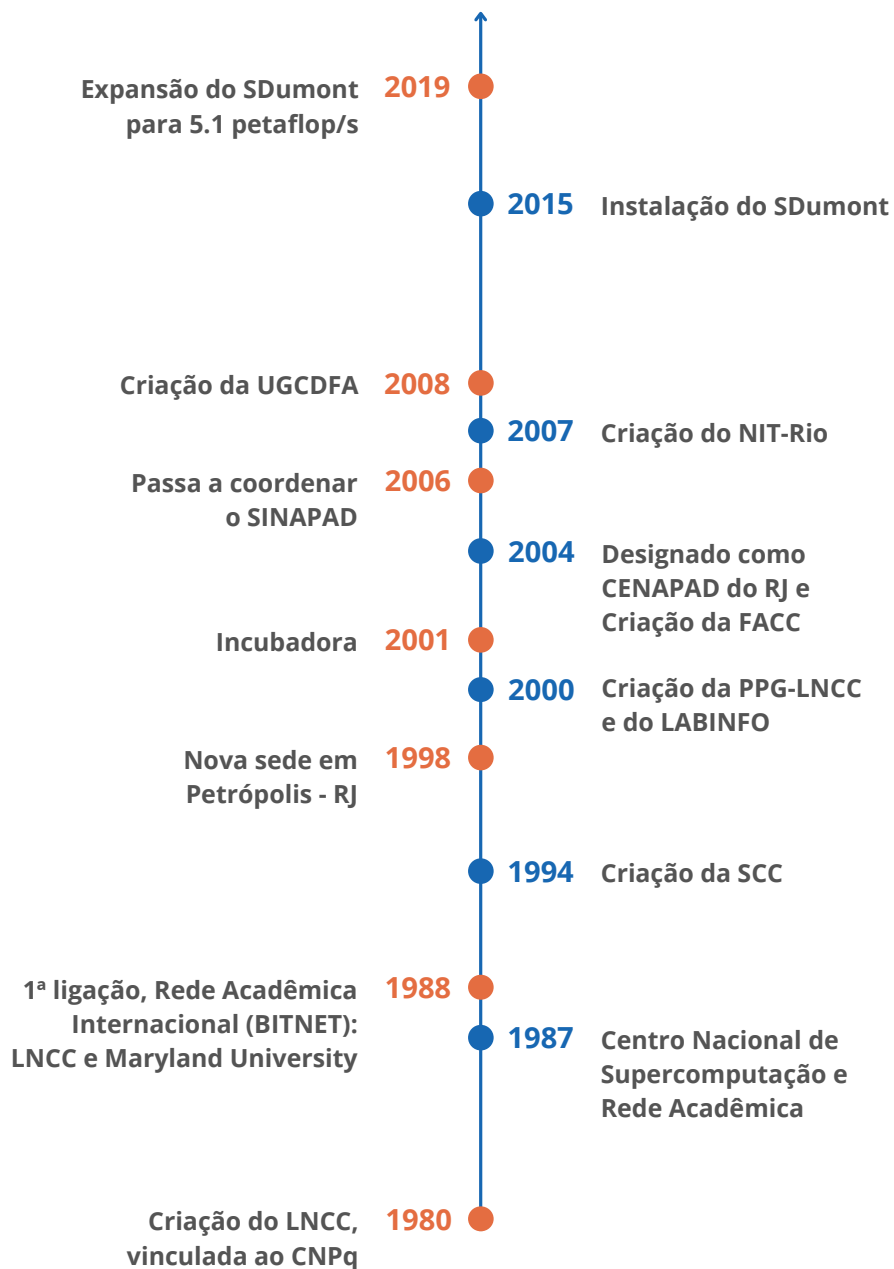
Ao longo de sua história, o LNCC tem disponibilizado, como Laboratório Nacional, o uso compartilhado de sua plataforma computacional de alto desempenho para toda a comunidade científica e tecnológica do país. Hoje, o LNCC é o nó principal do Sistema Nacional de Processamento de Alto Desempenho (SINAPAD). A aquisição do SDumont em 2015 representou um marco fundamental para o desenvolvimento da computação de alto desempenho no Brasil. No início de 2016, o SDumont iniciou sua operação, sendo disponibilizado a toda comunidade científica do país. Em 2019, houve a expansão da capacidade computacional do SDumont para 5.1 Pflop/s, o que reforçou ainda mais a importância estratégica do LNCC no cenário nacional como provedor de uma plataforma computacional de alto desempenho para a solução de problemas complexos que envolvem grande número de cálculos numéricos e manipulação massiva de dados.

Em 2000, o LNCC ampliou sua área de atuação com a criação do LABINFO com o apoio do Programa de Biotecnologia e Recursos Genéticos do MCTI, agregando e fortalecendo o aspecto interdisciplinar da proposta do programa de pós-graduação do LNCC, criado na mesma época. O LABINFO consolidou-se como referência na área de Bioinformática e Biologia Computacional no Brasil com a coordenação da Rede Genômicas Nacionais e Internacionais.

Em 2008, o LABINFO ampliou suas atividades com a criação da Unidade de Genômica Computacional “Darcy Fontoura de Almeida” (UGC DFA), a qual é uma unidade multiusuário na área de sequenciamento genômico de última geração. A associação LABINFO-UGC DFA teve por finalidade integrar as atividades de sequenciamento em larga-escala de DNA e de bioinformática, permitindo uma análise mais rápida dos dados. Devido a grande quantidade de dados gerados pelo sequenciamento em larga-escala de DNA, utiliza técnicas de HPC e de metodologias nas áreas de Inteligência Artificial (IA) e Big Data que permite maior agilidade no processamento e análise dos dados.

Nossa história se apresenta com os seguintes destaques apresentados na Figura 2:

Figura 2: Marcos históricos do LNCC.



O LNCC como uma Unidade de Pesquisa do MCTI possui um corpo técnico científico especializado em modelagem computacional.

Nas primeiras décadas, o LNCC se consolidou como um centro de referência em Computação Científica, com ênfase em Métodos Numéricos, Sistemas e Controle (Automação) e Ciência da Computação. Chegou a ter 4 membros titulares e 2 membros afiliados da Academia Brasileira de Ciências (ABC); 3 membros da Academia Nacional de Engenharia (ANE); 3 pesquisadores agraciados na classe de Comendador da ordem do mérito científico, bem como Doutor Honoris Causa em instituições no exterior dentre outras honrarias relevantes que incluem também alguns Fellowships de sociedades científicas importantes (*Institute of Electrical and Electronics Engineers (IEEE)* e *International Federation of Automatic Control (IFAC)*) e um número significativo de pesquisadores membros de corpos editoriais de periódicos renomados.

Vale salientar que, quando do lançamento dos primeiros editais do Programa de Apoio a Núcleos de Excelência (PRONEX) do CNPq, na época o mais ambicioso edital de cooperação entre grupos de pesquisa, o LNCC coordenou nacionalmente 2 projetos: um deles na área de Métodos Numéricos e o outro em Sistemas e Controle. Ressalta-se que, na primeira edição dos Institutos Nacionais de Ciência e Tecnologia (INCT), o LNCC coordenou o Programa de Medicina Assistida por Computação Científica (MACC), o INCT/MACC, sendo este o mais bem avaliado em 2016.

Mais recentemente, 4 de nossos pesquisadores fizeram parte da lista dos 2% dos pesquisadores mais influentes em suas áreas de pesquisa, segundo o ranking da PLOS Biology Journal com base nos estudos da Universidade de Stanford de 2021. (Fonte: Elsevier BV)

A atual equipe de pesquisadores do LNCC desenvolve pesquisa científica baseada na construção de modelos computacionais eficientes para descrever problemas advindos de diversos desafios científicos e tecnológicos presentes no dia a dia da sociedade. Dentre eles podemos ressaltar as várias aplicações que surgem nas áreas de: finanças, energia, prospecção de águas subterrâneas, armazenamento geológico de dióxido de carbono para mitigação do efeito estufa, planejamento de fármacos, conservação e remediação ambiental, defesa, segurança cibernética e saúde, abrangendo doenças cardiovasculares, câncer, doenças negligenciadas e a nova *Coronavirus disease 2019 (COVID-19)*, dentre outras.

É importante ressaltar a atuação do LNCC nas áreas de genômica, transcritômica, metagenômica, exoma, filogenômica, e pequenos RNAs desenvolvendo pesquisa nas áreas de saúde humana, animal, vegetal e em aplicações biotecnológicas e ambientais. Ressaltamos que o investimento científico tecnológico ao longo dos anos permitiu a geração de conhecimento para que o LABINFO, atualmente, tenha um papel fundamental na atuação de coordenações de projetos em rede, nacionais e internacionais, no enfrentamento da COVID-19, assim como de estudos em arboviroses, doenças genéticas e negligenciadas, resistência a antibióticos, estudos ambientais e de interesse biotecnológico.

Em suma:

O LNCC produz pesquisa científica de excelência, desenvolve tecnologias e inova na área de modelagem computacional, forma Mestres e Doutores em Modelagem Computacional com perfil genuinamente multidisciplinar, disponi-

biliza o SDumont e acessos a portais à comunidade científica, incuba empresas e difunde o conhecimento científico por meio de cursos e eventos.

4 Missão

Tendo em vista sua atribuição legal e suas capacidades, o LNCC tem como missão:

- i. Realizar pesquisa e desenvolvimento em computação científica, em especial a criação e a aplicação de modelos e métodos matemáticos e computacionais na solução de problemas científicos e tecnológicos;
- ii. Desenvolver e gerenciar ambiente computacional de alto desempenho que atenda às necessidades do País; e
- iii. Formar recursos humanos, promovendo transferência de tecnologia e inovação.

5 Visão de Futuro e Objetivos Estratégicos

Modelagem e simulação computacional são instrumentos estratégicos de análise, predição, projeto e tomada de decisões com imenso potencial de exploração em todas as áreas do conhecimento e capazes de gerar diversos benefícios para a sociedade moderna. No atual cenário de constante inovação tecnológica em escalas curtas de tempo, o impacto na sociedade e a relevância socioeconômica dos conhecimentos científico e tecnológico, bem como produtos decorrentes deles, direta ou indiretamente, pela modelagem computacional, só tendem a aumentar. Esta importância se torna ainda mais relevante se considerarmos que nos próximos anos é esperado um impacto significativo na inovação causado pelo desenvolvimento e uso de novas ferramentas baseadas em IA e computação quântica, aliadas à construção de modelos de alta fidelidade, baseados em primeiros princípios, onde o LNCC possui consolidado histórico de inserção no país. Neste sentido, a atuação do LNCC na pesquisa e no desenvolvimento tecnológico, em conjunto com a formação de Mestres e Doutores, na área de modelagem computacional, somada à oferta da plataforma de processamento de alto desempenho à comunidade científica, contribuem fortemente para o desenvolvimento socioeconômico brasileiro. Esta contribuição também se mostra essencial à soberania nacional, reduzindo a dependência tecnológica de outros países.

A implementação desta visão de futuro do LNCC envolve as seguintes ações estratégicas:

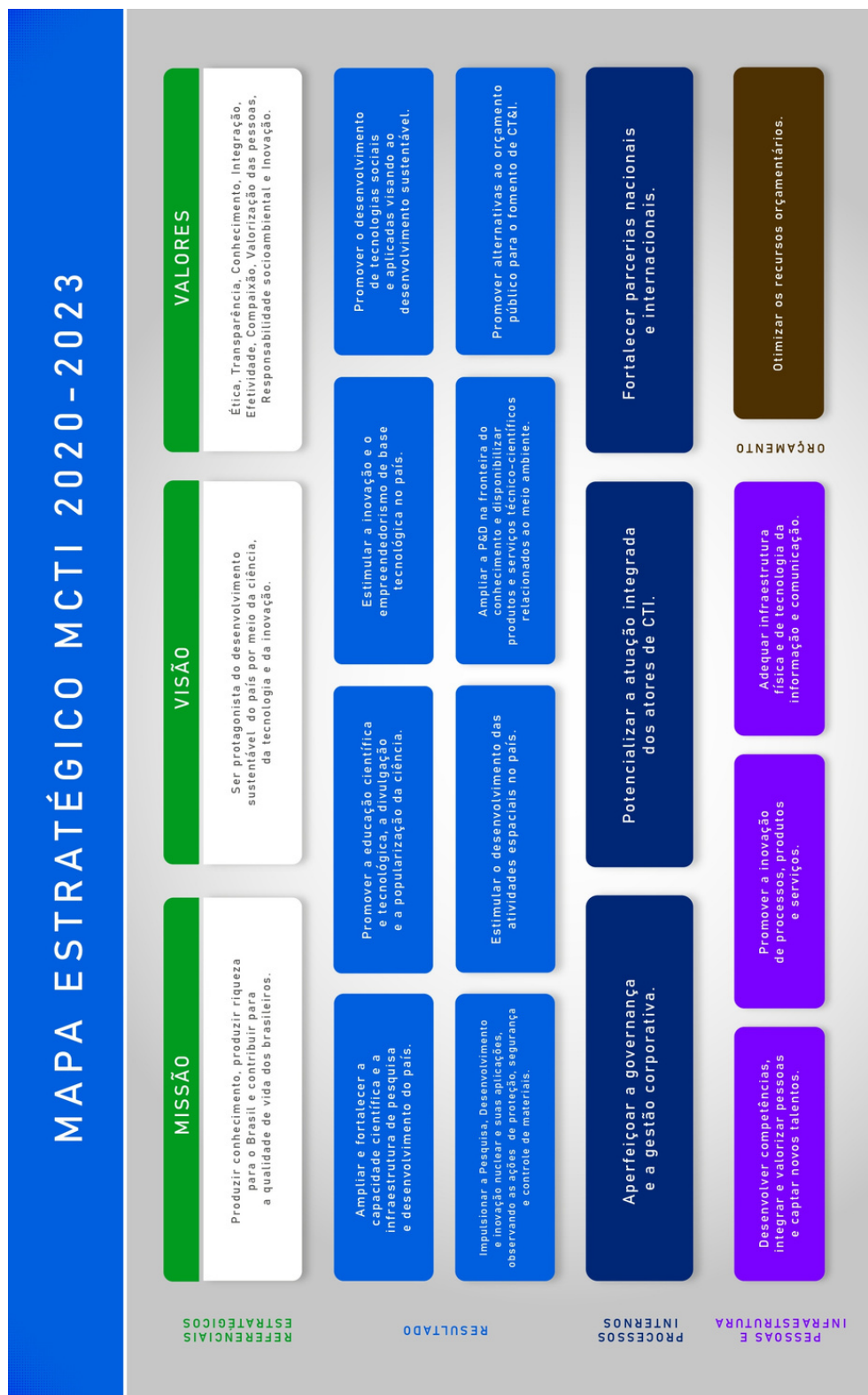
- i. Atuar na fronteira do conhecimento nas suas atividades de pesquisa e inovação com pesquisadores e tecnólogos altamente qualificados para o desenvolvimento de projetos de PD&I.
- ii. Atuar na construção de redes temáticas e de desenvolvimento de projetos estratégicos de pesquisa e inovação envolvendo universidades brasileiras, empresas e institutos de pesquisa internacionais.
- iii. Reforçar o seu papel como centro de excelência em Computação Científica, mantendo o SDumont dentro das 500 maiores plataformas computacionais de alto desempenho no mundo, assegurando uma atualizada proposta técnica e orçamentária, incluindo-a no

Plano Diretor de Tecnologia da Informação e Comunicação (PDTIC) e divulgando-a.

- iv. Estimular o acesso da comunidade científica à infraestrutura computacional de processamento de alto desempenho e supercomputação, divulgando amplamente as oportunidades e os resultados.
- v. Ampliar e aperfeiçoar a formação de recursos humanos altamente qualificados e a difusão da ciência e tecnologia produzidas no LNCC.
- vi. Prospectar oportunidades de parceria com indústrias, utilizando de todos os instrumentos de parceria disponíveis, com o apoio do NIT-Rio e da Empresa Brasileira de Pesquisa e Inovação Industrial (EMBRAPII). Neste sentido, implementar a gestão de portfólio, programas e projetos no LNCC, em atendimento à Portaria MCTI nº 5.847, de 3 de maio de 2022.
- vii. Buscar e viabilizar soluções para as carências orçamentárias, de pessoal e organizacionais, observando soluções adotadas por outras unidades de pesquisa e buscando soluções junto ao MCTI.

Observando a Portaria MCTI nº 5.695/2022, os objetivos estratégicos do LNCC estão definidos como: “ampliar e fortalecer a capacidade científica, tecnológica e a infraestrutura de pesquisa e desenvolvimento do país” e “promover a educação científica e tecnológica, a divulgação e popularização da ciência”, em concordância com o MAPA ESTRATÉGICO MCTI 2020-2023, mostrado na Figura 3.

Figura 3: Mapa Estratégico MCTI 2020-2023.



Na Tabela 2, é possível verificar quais os temas estratégicos de PD&I, de acordo com a Portaria MCTI nº 5.109/2021 e com a Estratégia Nacional de Ciência, Tecnologia e Inovação (ENCTI) 2016-2022, que possuem aderência às linhas de pesquisa desenvolvidas no LNCC.

Tabela 2: Áreas de PD&I - Portaria MCTI nº 5.109/2021.

Áreas de tecnologias	Setores
Estratégicas	Cibernética
Habilitadoras	Inteligência Artificial Materiais avançados Biotecnologia Nanotecnologia
Produção	Indústria Agronegócio Infraestrutura
Desenvolvimento Sustentável	Cidades inteligentes e sustentáveis Energias renováveis Tratamento de poluição Monitoramento, prevenção e recuperação de desastres naturais e ambientais Preservação ambiental
Qualidade de vida	Saúde
Promoção, popularização e divulgação de CT&I	Ensino de ciências Comunicação social

6 Valores e Princípios

Os valores e princípios refletem a história do LNCC como Unidade de Pesquisa atuante na fronteira do conhecimento, atenta a seu papel perante a comunidade científica e acadêmica e a sociedade. Os valores têm a ética como padrão essencial de conduta, e norteiam-se pelos princípios:

- i. Excelência e mérito profissional.
- ii. Valorização da Ciência.
- iii. Estímulo à criatividade.
- iv. Cooperação com instituições acadêmicas, institutos de CT&I e empresas.
- v. Valorização, aperfeiçoamento e capacitação de recursos humanos.
- vi. Dedicção e eficiência nas atividades profissionais.
- vii. Responsabilidade pública e social.

- viii. Transparência nas ações.
- ix. Obediência aos princípios constitucionais da legalidade, da impessoalidade, da moralidade, da igualdade, da publicidade e da probidade administrativa.

7 Cenários

Nesta seção, descreveremos alguns cenários importantes para o cumprimento dos objetivos estratégicos do LNCC no período 2023-2027.

7.1 Infraestrutura de HPC

O SDumont é a maior instalação de HPC da América Latina dedicada à Ciência. Atualmente é utilizado por mais de 3.000 usuários e mais de 300 projetos de pesquisa, em 19 diferentes áreas de pesquisa. O SDumont possui 34.688 cores distribuídos em 1.132 unidades de processamento, cuja soma da capacidade de processamento alcança 5,1 PFlop/s.

Instalado em 2015 com 1 PFlop/s e ocupando as posições de 146 no mundo e 1 no Brasil, o SDumont foi ampliado em 2019 para a capacidade atual. Agora em 2022 permanece como o mais potente supercomputador disponível à comunidade científica brasileira, entretanto, um dos grandes objetivos do LNCC com relação à infraestrutura em HPC é manter o SDumont atualizado entre os 500 supercomputadores mais rápidos do mundo. Este desafio decorre da necessidade de manter a capacidade de processamento no estado da arte de forma a favorecer a pesquisa nacional e as cooperações internacionais.

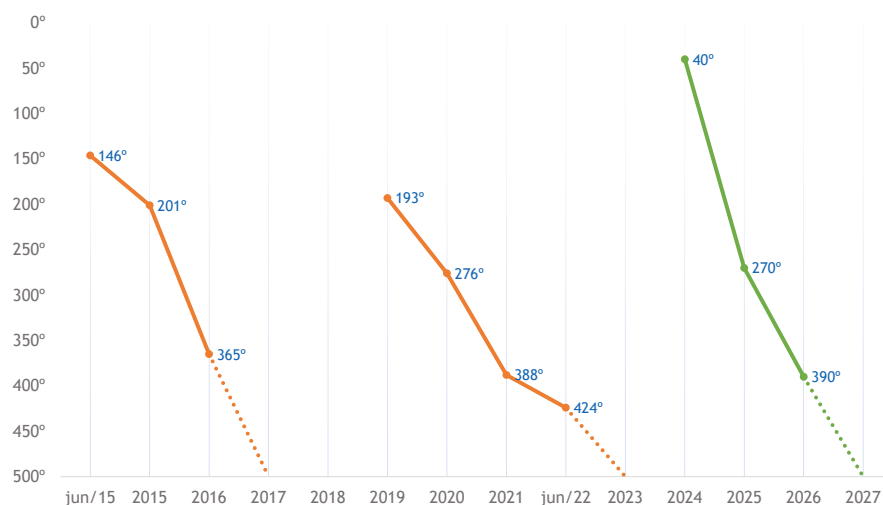
A supercomputação é tecnologia com grande capacidade de disrupção e assim permanecerá no futuro, alcançando mais altas complexidades no estudo dos fenômenos e propiciando capacidade de inovação tecnológica ao Brasil. Em termos de propriedade intelectual, é estratégico o provimento da computação científica por órgão público, livre dos interesses econômicos de empresas privadas, os quais poderiam afetar o alcance dos resultados e o sigilo dos dados.

Para a manutenção do SDumont na lista dos 500 mais potentes supercomputadores (<https://top500.org>) será necessário obter recursos orçamentários de tal modo a realizar a cada 5 anos uma modernização dos equipamentos que compõem a máquina. Como a última atualização aconteceu em 2019, a próxima deverá ser realizada em 2024, ao custo estimado de US\$ 60 milhões.

A Figura 4 apresenta a evolução do SDumont na lista dos 500+ supercomputadores e o cenário esperado para os próximos 5 anos, dados de novembro de cada ano e de junho de 2022.

Com relação à computação quântica, área de pesquisa do LNCC, vemos que terá papel relevante nos próximos anos e deverá ter papel estratégico em áreas como a de segurança cibernética, aeroespacial, químico, saúde, logística e financeiro. A computação quântica não é ficção científica. É uma tecnologia real que transformará nosso futuro e o de praticamente todas as indústrias. É uma tecnologia disruptiva que resolverá vários problemas no ecossistema de negócios atual.

Figura 4: Evolução do SDumont na lista TOP500.



Obs 1: Nos anos 2017 e 2018, o supercomputador do LNCC ficou fora da lista, o que projeta-se que aconteça novamente na lista que será divulgada em novembro de 2022 e 2023.

Obs 2: Em verde, a projeção de futuro para o SDumont, onde planeja-se o retorno à lista dos 500+ em 2024, após uma nova ampliação de sua capacidade.

7.2 Orçamento

As mudanças institucionais do Governo Federal, ocorridas entre o PDU 2018-2022 e este PDU, somadas ao aprofundamento da crise fiscal e o ressurgimento da inflação na economia brasileira, tornam provável a manutenção do cenário de contingenciamento orçamentário e restrição da disponibilidade de recursos não orçamentários para o fomento de novas pesquisas, para os próximos anos.

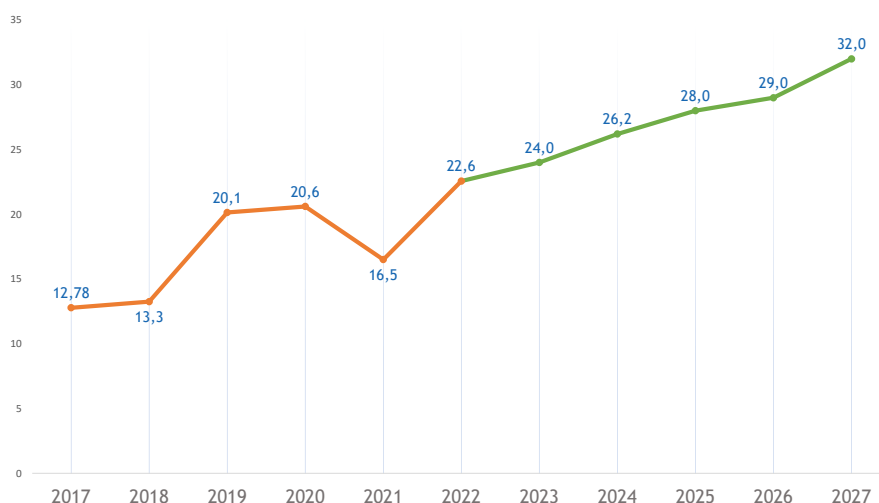
O ano de 2021 foi de profunda crise orçamentária, devido à redução orçamentária e demora na liberação integral do orçamento anual. O atraso na aprovação da Lei Orçamentária Anual (LOA)-2021 impactou também os recursos para apoio de projetos de pesquisa e de bolsas.

A restrição orçamentária, diretamente por razões de déficit público ou indiretamente devido ao aumento geral de preços (inflação), é um desafio esperado para os próximos 4 anos.

Novas oportunidades de fomento da atividade finalística do LNCC decorrerão de novos mecanismos de parceria (como os editais de PD&I da EMBRAPA) mas, também dependerão da situação macroeconômica do Brasil e da situação política internacional.

O orçamento anual do LNCC nos últimos anos está representado na Figura 5, assim como a expectativa para os anos contemplados neste PDU (em verde). Em 2021, foram executados 99,90% do limite de empenho.

Figura 5: Orçamento anual, em milhões.



7.3 Marco Legal

Apesar de avanços no marco legal, como exemplo a divulgação de pareceres da Consultoria Jurídica da União (CJU) e da Advocacia-Geral da União (AGU) sobre os instrumentos de PD&I, é sentida uma lacuna de ação do MCTI na definição de regras gerais para regulamentação pelas Unidades de Pesquisa de temas como o ressarcimento, o desenvolvimento institucional junto à fundação de apoio, os limites da dedicação do pesquisador a projetos com parceiros externos à ICT etc. Esta ausência resulta em diferenças de regulamentos entre as ICT, o que provoca atritos entre a Administração, pesquisadores e parceiros, já que a regra de uma ICT, ainda que submetida à CJU, não pode ser automaticamente aplicada à outra.

Os últimos anos foram de grandes transformações na Administração, com a adoção pelo Governo Federal de sistemas informatizados de registro, que permanecem, contudo, carentes de instrumentos de análise.

Na Administração Federal, muito se fez no nível da regulamentação, sem que houvesse alterações na legislação. A expectativa é de que o processo de centralização administrativa não seja revertido nos próximos 5 anos, mas é provável que os órgãos de controle, como Tribunal de Contas da União (TCU), Controladoria-Geral da União (CGU) e Advocacia-Geral da União (AGU), tragam à tona conflitos entre a normativa e a legislação, recomendando cautela na internalização da regulamentação.

7.4 Recursos Humanos

A não reposição de servidores, pela falta de concursos públicos nos últimos anos, impacta negativamente a capacidade administrativa, científica, de formação de recursos humanos e de geração de inovação do LNCC. Esta carência reduz as possibilidades de especialização do trabalho, em especial o administrativo, levando ao acúmulo de atribuições. As atividades de pesquisa e de ensino também são negativamente afetadas por esta carência de recursos humanos, que reduz a capacidade de produção.

Os números referentes aos recursos humanos do LNCC podem ser observados na Tabela 3 e, mais abaixo, na Figura 6.

Tabela 3: Recursos humanos do LNCC.

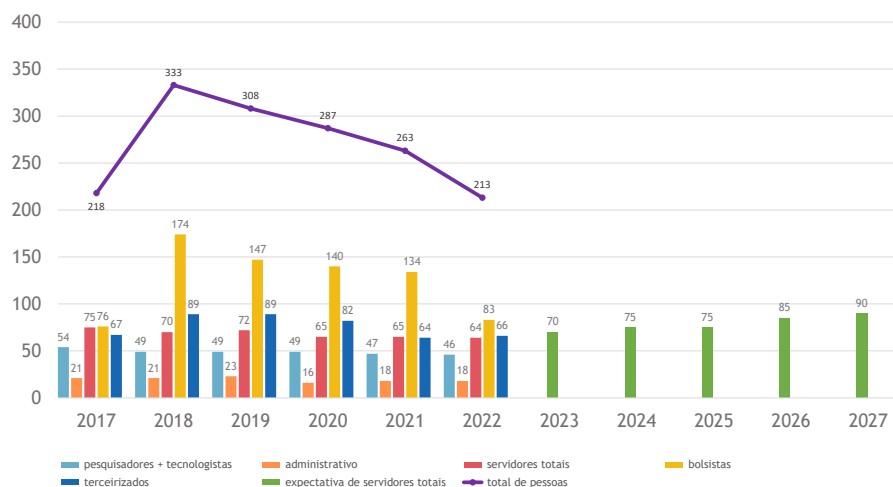
	2017	2018	2019	2020	2021
Pesquisadores + Tecnologistas	54	49	49	49	47
Administrativo	21	21	23	16	18
Total de servidores	75	70	72	65	65
Total de bolsistas	76	174	147	140	134
Terceirizados	67	89	89	82	64
Total	218	333	308	287	263

OBS.: Dos 65 servidores em exercício ao final de 2021, 14 estão aptos à aposentadoria e 3 estavam afastados em 31/12/2021.

Com a reforma das regras de aposentadoria, os servidores aposentam-se em idades mais avançadas e, naturalmente, enfrentam dificuldades com necessidades de saúde e de acesso a cursos de aperfeiçoamento, em especial aqueles de maior duração. A não realização de concurso público impõe uma perda sistêmica sobre a capacidade de adaptação às novas tecnologias de administração, prejudicando, ao final, a própria pesquisa.

Embora o Governo Federal, por intermédio do MCTI, esteja sendo periodicamente mantido a par da necessidade de reposição da força de trabalho, a melhor expectativa é a de que concursos públicos somente ocorram a partir de 2024. Até lá, será preciso avançar sobre outras modalidades de contratação e de parcerias.

Figura 6: Recursos humanos.



8 Ações e Programas

8.1 Linha de Ação de Pesquisa e Desenvolvimento

Em consonância com o pilar estratégico: “promoção da pesquisa científica básica e tecnológica”, o LNCC desenvolve pesquisas em duas coordenações e laboratórios, sob um mesmo Programa, que se descreve a seguir. Ressalte-se que alguns projetos são compartilhados entre pesquisadores de diferentes áreas do LNCC, refletindo a integração entre temas e o desenvolvimento multidisciplinar dos mesmos.

Este programa envolve três grandes linhas:

- i. **Pesquisa fundamental no desenvolvimento de métodos numéricos** para simulação computacional de problemas envolvendo sistemas contínuos, teoria de sistemas, controle e sinais, modelagem de sistemas complexos utilizando abordagens multiescala e multifísica, desenvolvimento de métodos de otimização e problemas inversos, bem como algoritmos de computação quântica e de IA;
- ii. **Pesquisas aplicadas com impacto tecnológico e de inovação** nas áreas de armazenamento geológico de gases de efeito estufa (CO_2) e energia limpa (e.g., hidrogênio verde e azul), reservatórios de petróleo e aquíferos, bioinformática e biologia computacional, planejamento de fármacos, tratamento de tumores associados ao câncer e funcionamento do sistema cardiovascular humano;
- iii. **Pesquisas na área da ciência da computação** envolvendo computação massivamente paralela e distribuída, computação em nuvem, visualização científica, ambientes colaborativos de realidade virtual e aumentada, ciência de dados e IA.

A evolução e o amadurecimento dos métodos numéricos para a resolução aproximada de modelos matemáticos têm permitido realizar a simulação computacional de sistemas complexos com alta fidelidade e realismo. Nesse sentido, uma vez compreendido o fenômeno em estudo bem como sua formulação matemática e computacional, métodos de otimização e problemas inversos são empregados de modo a, por exemplo, melhorar a eficiência do sistema que governa o fenômeno ou determinar seus parâmetros, respectivamente. Dentre as diversas aplicações dessas técnicas, destacam-se otimização de forma e topológica, reconstrução de anomalias em sistemas mecânicos, geológicos e biológicos, simulação não invasiva de procedimentos médicos, processamento de imagens, síntese e projeto ótimo de microestruturas e modelagem de fenômenos dissipativos, incluindo mecânica da fratura e do dano, entre outros. Aliados aos métodos numéricos, de otimização e problemas inversos anteriormente mencionados, assumem grande destaque as novas gerações de modelos matemático-computacionais baseados no conceito de aprendizagem de máquina. Esta área da ciência tem evoluído de forma substancial nos últimos anos, alavancada pela sinergia entre os métodos numéricos e de otimização, as grandes massas de dados, e as arquiteturas baseadas em unidades de processamento gráfico. Neste contexto, novos e grandes desafios estão presentes tanto na área de métodos numéricos como na integração de técnicas de aprendizagem de máquina e estratégias numéricas e de otimização de caráter mais convencional. De fato, os últimos anos foram marcados pela popularização do uso de computadores com arquiteturas massivamente paralelas e com acesso a processadores gráficos cuja utilização viu-se facilitada pela disponibilidade de arcabouços que favorecem

o desenvolvimento de diversos modelos de aprendizagem de máquina. Esse novo paradigma implica na revisão do que se espera dos simuladores computacionais. Além da necessidade de precisão e robustez por parte dos métodos numéricos, será cada vez mais frequente a necessidade de incorporar grandes massas de dados no processo de desenvolvimento de modelos computacionais. O paradigma da IA aliada à computação científica, de forma natural, fornece esse marco científico. Grande parte dos desafios na ciência contemporânea pode se beneficiar desta parceria a partir da exploração das arquiteturas computacionais heterogêneas (i.e., diferentes tipos de processadores e arranjos de memória), como as disponíveis no SDumont, instalado no LNCC.

A área de pesquisa de **Sistemas e Controle** tem como objetivo o estudo do comportamento de sistemas dinâmicos e o desenvolvimento de estratégias visando a que se obtenha um desempenho ou propósito desejados. Esta área do conhecimento é bastante abrangente e intrinsecamente interdisciplinar, tendo aplicações nas mais variadas áreas, tais como biologia, ecologia, sistemas de energia elétrica e robótica. A modelagem de problemas em finanças através de sistemas dinâmicos estocásticos é também um notório exemplo de área de pesquisa. A teoria de controle tem tido um papel fundamental no desenvolvimento de sistemas de tecnologia avançados, tendo sido instrumental na automação industrial, em campos como aeronáutica, tecnologia automotiva, eletrônica, e em projetos espaciais. Inúmeros produtos e equipamentos que usamos no dia a dia dependem de sistemas de controle para a sua qualidade e operação adequada. O processamento de sinais e de imagens visa investigar representações e propriedades de sinais e imagens com objetivos diversos: armazenagem eficiente, visualização de informações, realização de modificações controladas, análise, síntese, detecção e classificação de sinais e imagens, dentre outras tarefas que são demandadas por diversas aplicações tecnológicas modernas, desde comunicações móveis à bioinformática, passando por sistemas de informação, IA e medicina assistida por computação.

As pesquisas em **Teoria de Sistemas, Controle e Sinais** no LNCC são reconhecidas como referência nacional e internacional, sendo tal liderança evidenciada, por exemplo, através de publicações em periódicos internacionais de prestígio, citações de seus trabalhos científicos na Web of Science e honrarias de prestígio de sociedades científicas nacionais e internacionais de renome. As áreas de pesquisa consolidadas no LNCC em Sistemas, Controle e Sinais incluem: Modelagem, Controle e Filtragem de Sistemas Dinâmicos Estocásticos; Controle e Filtragem de Sistemas Dinâmicos Sujeitos a Incertezas (incluindo falhas); Processamento Digital de Sinais e Imagens; Controle e Análise de Equações Diferenciais Parciais; e Modelagem Estocástica em Finanças.

O advento da internet, em conjunção com computadores cada vez mais potentes, tem introduzido diversos novos desafios na área de sistemas e controle. Por exemplo, as tecnologias de informação introduziram um novo tópico de pesquisa denominado na literatura controle em rede (networked control). Esse tópico introduz no problema de controle questões relevantes associadas a sistemas de telecomunicações em rede. Isso inclui, por exemplo, fenômenos tais como: retardos, intervalos de amostragem, perda de dados e as restrições de comunicações que influenciam a estabilidade e a performance do controle. Como consequência, isso requer o desenvolvimento de novas técnicas e ferramentas para analisar o problema de controle nesse cenário. Por outro lado, a quantidade massiva de dados decorrentes das novas tecnologias de informação impulsionou a área de IA

através dos avanços obtidos com algoritmos de aprendizagem de máquina (deep learning, reinforcement learning, data driven control etc.), que têm sido utilizados com sucesso em diversas aplicações. Mais recentemente, notam-se avanços substanciais no entendimento do funcionamento desses algoritmos, que têm um grande potencial de contribuir para o avanço na solução de alguns problemas importantes na área, incluindo o problema de controle com observações parciais. O uso desses algoritmos introduz questões relevantes de segurança, tais como o problema conhecido como “adversarial attack”, “denial-of-service-attack”, dentre outros. A garantia de confiabilidade e robustez de alguns sistemas de controle críticos requer a incorporação dessas estratégias na abordagem do problema.

Tendo em vista o que foi mencionado no parágrafo acima, e como perspectivas futuras, pretende-se incorporar às atividades de Sistemas, Controle e Sinais do LNCC tópicos estratégicos, tais como: controle via técnicas de aprendizagem de máquina; problemas de segurança cibernética e de robustez a ataques adversariais; e controle de sistemas em rede e aplicações em robótica.

A Modelagem Computacional Multiescala e Multifísica de Sistemas Complexos com alto teor de heterogeneidade envolve a previsão numérica da resposta de diversas estruturas presentes no dia a dia da sociedade brasileira, as quais implicam em novos e importantes desafios científicos e tecnológicos. Dentre elas podemos destacar formações geológicas (e.g., reservatórios de petróleo, aquíferos, domos salinos, solos, minas de carvão, e materiais granulares) bem como aspectos fisiológicos e mecanobiológicos do sistema cardiovascular humano, e estruturas biológicas complexas em geral. Na análise de sistemas caracterizados por meios porosos, a descrição dos fenômenos de natureza mecânica, hidrodinâmica, térmica, química e biológica que ocorrem comumente nesta classe de sistemas complexos está em destaque na sociedade, uma vez que estes sistemas têm sido explorados para viabilizar armazenamento geológico de gases de efeito estufa. Como exemplo podemos destacar os materiais nano porosos utilizados para adsorção seletiva de CO_2 (e.g., zeólitas, carbono ativado, MOF, argilas, carvão) os quais têm sido explorados com sucesso para captura e posterior utilização do CO_2 . No contexto geológico, reservatórios depletados, aquíferos, camadas de carvão e principalmente minas de sal devido ao comportamento de fluência, têm sido testados como repositórios para estocagem de gases na subsuperfície terrestre. É importante ressaltar que a adsorção seletiva pelo CO_2 comparado com demais gases, (e.g., hidrocarbonetos, metano), fornece oportunidade única para modelar o processo de separação de gases desejáveis e indesejáveis contribuindo assim para a mitigação do aquecimento global e simultaneamente geração de energia sem emissões líquidas de gases de efeito estufa. Além disto, nas aplicações envolvendo energia renovável, problemas de natureza similar e descritos por técnicas similares de modelagem em múltiplas escalas, surgem naturalmente da estocagem de gases limpos, onde podemos destacar o hidrogênio verde e azul. Ao contrário do CO_2 , tal cenário é caracterizado por fenômenos sucessivos de extração e injeção de H_2 de natureza cíclica ditada pela demanda energética sazonal. Dada a natureza genuinamente multidisciplinar do problema, o LNCC dispõe de equipes com conhecimento profundo no tema para a construção da modelagem acurada dos diversos processos de captura e utilização de CO_2 e H_2 e assim extrapolar os resultados experimentais com confiabilidade para diversos cenários.

Assim, no cenário nacional, o LNCC possui papel articulador com demais grupos de pesquisa, atuando como elemento catalisador na construção de redes temáticas com

sinergia na resolução dos desafios que surgem na captura e utilização de carbono e na construção de soluções para mitigar os efeitos devastadores das mudanças climáticas.

Os avanços tecnológicos na área de **Biologia Molecular**, sobretudo com o advento do *Next-generation Sequencing* (NgS) na área de genômica, transcritômica, exoma, pequenos RNAs e metagenômica causaram um aumento exponencial do volume de dados o que tornou a geração, o armazenamento, a análise e a respectiva manipulação dos (meta)dados obtidos, um dos grandes desafios da bioinformática e da biologia computacional. A UGCDFE, criada em 2008, que está associada ao LABINFO, criado em 2000, tem a finalidade de integrar as atividades de sequenciamento em larga-escala de DNA e de bioinformática, utilizando a infraestrutura de HPC do SDumont, permitindo uma análise mais rápida dos dados gerados pelos sequenciadores de DNA de nova geração instalados. Além disso, devido a variedade e quantidade de informações geradas, técnicas de IA, mineração de dados e de biologia de sistemas são empregadas para descoberta e reconhecimento de padrões em dados biológicos. Os projetos de pesquisa desenvolvidos estão em sintonia com a estratégia Nacional de CT&I e estão relacionados às áreas da saúde humana, animal e vegetal, biotecnológica e à área ambiental que geram informações importantes do ponto de vista tecnológico com aplicações diretas. Além disso, como um de seus objetivos é o de cooperar com instituições de pesquisa e acadêmicas, nacionais, regionais e internacionais, sendo na sua maioria no formato de redes, envolve alunos de graduação e pós-graduação. Passados 22 anos desde sua criação, o conhecimento e experiência adquiridos permitiram que o LABINFO tivesse um papel importante nas epidemias de ZIKA, Febre Amarela e Chikungunya. Desde março de 2020, vem atuando no estudo da COVID-19 por meio da Rede CORONA-ÔMICA-RJ (<http://www.corona-omica.rj.lncc.br/>), aprovada e apoiada pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ), onde mais de 8.000 genomas de SARS-CoV-2 foram sequenciados na UGCDFE, para a realização de estudos de vigilância genômica com o objetivo de atuar no controle da epidemia no Estado do Rio de Janeiro. Da mesma forma, faz parte da rede vírus do MCTI, NgS-BRICS e Coalizão Multi-ômicas, do ministério da saúde fazendo sequenciamento em outros estados brasileiros. Nessa nova fase da pandemia, está realizando pesquisa em pacientes para compreensão dos mecanismos para os diferentes desfechos da doença usando técnicas de biologia de sistemas.

A **descoberta de novos fármacos** é um processo longo e altamente custoso, levando de 10 a 15 anos de pesquisa e cerca de um bilhão de dólares para introduzir um novo fármaco no mercado. O uso e desenvolvimento de novas abordagens computacionais que possam propiciar uma maior eficiência e tornar menos caro o processo de desenvolvimento de novos fármacos é algo extremamente desejável e com potencial de gerar grande impacto em termos econômicos e de saúde pública. As abordagens *in silico* do campo da bioinformática e modelagem computacional são críticas para reduzir os custos nas fases iniciais de priorização de alvos moleculares nos organismos de estudo, sejam estes humano ou patógenos clínicos. A priorização *in silico* se concentra no uso extensivo de abordagens integrativas multi-ômicas para revelar o conhecimento sobre alvos promissores para reduzir o espaço de pesquisa no qual os medicamentos candidatos podem ser desenvolvidos. Técnicas computacionais que sejam capazes de prever o modo de ligação e os detalhes do tipo de reconhecimento molecular receptor-ligante, tais como o atracamento molecular, assumem cada vez mais um papel fundamental, principalmente em estudos de larga escala, conhecidos como triagem

virtual, que têm sido utilizados pelas indústrias farmacêuticas e grupos de pesquisa na busca de novos compostos protótipos. O desenvolvimento e uso de técnicas de IA no planejamento de fármacos têm crescido vertiginosamente nos últimos anos, viabilizado pelos avanços no desenvolvimento de hardware e na disponibilização de grandes bancos de dados. Recentemente, técnicas sofisticadas de IA, como aprendizagem profunda, associadas a plataformas computacionais de alto desempenho, têm alcançado grande sucesso na investigação de bibliotecas contendo dezenas de milhões, e até bilhões, de compostos, conhecidas como ultra-large libraries. Em paralelo, na descoberta de novos compostos protótipos e candidatos a fármacos, tem se observado resultados bastante promissores obtidos com as técnicas baseadas no conceito de *Generative Adversarial Networks* (GANs) em conjunto com técnicas de aprendizagem por reforço. Na área de planejamento de fármacos utilizando técnicas de ancoramento molecular, o LNCC tem atuado fortemente através do desenvolvimento de novos programas, metodologias e algoritmos os quais são disponibilizados de forma gratuita através da plataforma web DockThor-VS (<https://www.dockthor.lncc.br>), acoplada ao SDumont. Durante a pandemia da COVID-19, foram realizados esforços para viabilizar o uso do portal DockThor-VS na busca de novos tratamentos contra a COVID-19, disponibilizando bancos de fármacos aprovados pelo *Food and Drug Administration* (FDA) e de estruturas curadas de importantes alvos terapêuticos de SARS-CoV-2 e suas variantes genômicas, relevantes para estudos de triagem virtual em larga escala. O portal web DockThor-VS tem sido amplamente utilizado pela comunidade científica nacional e internacional sendo que no ano de 2021 foram submetidos mais de 29.000 experimentos por usuários de diversas partes do mundo, sendo 4.507 utilizando os alvos terapêuticos de SARS-CoV-2 disponíveis no portal.

Novos desafios e paradigmas surgem na **Ciência da Computação** como um todo e especificamente na computação massivamente paralela e distribuída, na computação em nuvem, na computação quântica, na visualização científica, nos ambientes colaborativos de realidade virtual e aumentada, na ciência de dados, e nos fundamentos da IA, impactando a pesquisa e o desenvolvimento de modelos, métodos e algoritmos robustos e altamente eficientes do ponto de vista computacional. No contexto desses desafios, o LNCC tem desenvolvido projetos de pesquisa e promovido eventos científicos e de capacitação, concentrando-se em 4 áreas: Computação massivamente paralela e distribuída, e em nuvem; Informação e computação quântica; Visualização científica e ambientes colaborativos; e Ciência de dados, Inteligência Artificial e Big Data.

Do ponto de vista técnico-científico, constitui-se um desafio o estudo metódico para a extração generalizada e em escala de conhecimento relevante a partir de massas de dados, em geral dinâmicas. A abordagem a esse desafio com aplicações em diversas áreas no eixo ciência-indústria-governo emerge como uma nova espécie de ciência.

A **Ciência de Dados** tem por objetivo identificar os princípios, métodos e técnicas fundamentais para o gerenciamento e análise de dados, possivelmente de grande volume (Big Data), bem como a construção de modelos que descrevem o fenômeno subjacente que dá origem aos dados. A modelagem baseada em dados está associada a diferentes termos, vários deles contextualizados dentro da grande área de IA, como “aprendizagem de máquina”, “aprendizagem estatística”, “reconhecimento de padrões” e “mineração de dados”, entre outros. Seu objetivo é extrair padrões inerentes a um determinado fenômeno usando observações coletadas a respeito do objeto de estudo. Por “observações” entendam-se, aqui,

dados extraídos diretamente do fenômeno em questão. Esses dados podem ou não depender da interpretação do observador. Na modelagem baseada em dados o conhecimento prévio a respeito do fenômeno não precisa ser incorporado ao modelo. Como as técnicas da área não requerem uma descrição do processo físico subjacente aos dados, elas podem ser aplicadas mesmo que os detalhes do fenômeno de interesse não sejam completamente compreendidos ou não possam ser facilmente simulados. Nesse sentido, a área contrasta e complementa a modelagem baseada em princípios fundamentais (ou “primeiros princípios”), cuja construção de modelos se apoia fortemente em um entendimento do fenômeno de interesse. Mais recentemente, uma estratégia híbrida, denominada de “aprendizagem de máquina informada por física” vem sendo intensamente investigada na academia e no LNCC. Essa estratégia baseia-se nas limitações das duas estratégias anteriores. Nos modelos baseados puramente em primeiros princípios, nem sempre consegue-se incorporar transparentemente incertezas nos dados ou lidar eficientemente com problemas de alta dimensionalidade governados por equações largamente parametrizadas. Nos modelos baseados puramente em dados, pode-se necessitar de grandes volumes de dados nem sempre disponíveis em problemas científicos. Na aprendizagem de máquina informada por física, modelos de regressão podem ser treinados com poucos dados, a partir da inserção de leis físicas dentro do próprio processo de treinamento. Trata-se de uma estratégia de natureza altamente interdisciplinar, combinando conhecimentos em modelagem física, matemática aplicada e computação, portanto, com forte alinhamento a várias das linhas de pesquisa do LNCC.

Ao longo das últimas décadas, pesquisadores das áreas de modelagem computacional conjuntamente com profissionais da área médica começaram a desenvolver e aplicar, de forma cada vez mais frequente (e intensiva), ferramentas baseadas em modelos computacionais dentro de diferentes áreas da prática médica. Como consequência disso, os modelos computacionais têm evoluído significativamente com relação às capacidades de descrição e predição dos fenômenos mais relevantes que governam a resposta dos sistemas fisiológicos e biológicos que integram o corpo humano. No contexto da modelagem do sistema cardiovascular humano, diversas condições tais como a doença aterosclerótica, a hipertensão, e o desenvolvimento de aneurismas e tumores, vêm sendo estudados com sucesso através de técnicas de simulação, pois permitem experimentar e formular hipóteses de forma complementar às limitadas técnicas de análise *in-vivo*. O anterior, somado ao vertiginoso aumento do desempenho dos computadores e das máquinas da aquisição de imagens médicas, assim como também o desenvolvimento de técnicas de aprendizagem de máquina, tem dado lugar ao surgimento de um novo paradigma na medicina: a medicina assistida por computação científica. Esta quebra de paradigma é o entendimento da ciência no campo da medicina como sendo construída de uma forma racional e mecanística, apoiada em princípios fundamentais da mecânica, da biologia e da fisiologia, e integrando estes princípios com dados clínicos e imagens médicas, sendo possível representar com alto grau de precisão os fenômenos subjacentes aos sistemas fisiológicos do corpo humano. Ao longo dos anos, o LNCC tem construído uma base de conhecimento sólida no âmbito da computação científica aplicada à saúde. Em particular, estes conhecimentos integram fenômenos da mecânica dos fluidos, da mecânica dos sólidos, de transporte, de propagação de ondas, químicos, biológicos e fisiológicos, possibilitando o desenvolvimento de técnicas multiescala e multifísica, e caminhando na direção de um paradigma de medicina orientada a cada paciente específico. De forma complementar, as técnicas baseadas em modelos de

aprendizagem de máquina possuem um potencial que será explorado para resolver questões que possam ser alavancadas por meio da disponibilidade de grandes massas de dados. Como resultado, o LNCC continuará a se destacar nesta área, e tem o desafio de liderar os próximos passos, que envolvem, por um lado, a contínua sofisticação dos modelos destes sistemas vivos, incorporando capacidades diagnósticas e prescritivas, e, por outro lado, a transferência de tecnologia desenvolvida para o setor produtivo.

8.2 Linha de Ação de Serviços de Computação de Alto Desempenho - HPC

Em consonância com o pilar estratégico “modernização e ampliação da infraestrutura de CT&F”, o LNCC disponibiliza à comunidade científica e de inovação tecnológica brasileira serviços de HPC sem paralelo na América Latina. HPC é atualmente uma área chave para a pesquisa científica e industrial. Iniciativas de pesquisa de espectro amplo, custo alto e intensivas de computação (como física de altas energias, climatologia, biomedicina, energia renovável e aeronáutica, para citar algumas) têm promovido historicamente a área de HPC nos países mais desenvolvidos economicamente, como Estados Unidos, Europa, Japão e, mais recentemente, China. O impacto exponencial da IA coloca a área de HPC em outro nível de penetração, afetando economia e sociedade globalmente. Em 2015, o Brasil deu um passo importante para aumentar sua competitividade em HPC com a aquisição do SDumont via recursos do Fundo Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FNDCT). O SDumont é uma infraestrutura compartilhada de apoio à comunidade científica e de inovação tecnológica brasileira, instalado no LNCC. Graças a uma parceria com o Consórcio de Libra (formado pela Petrobras e seus parceiros Shell, Total, CNPC e CNOOC), essa infraestrutura teve sua capacidade expandida consideravelmente em 2019, sendo atualmente o único supercomputador da América Latina presente na lista dos 500 maiores supercomputadores do mundo (top500.org) que é aberto a toda a comunidade científica e de inovação tecnológica.

A geração de resultados do nível daqueles alcançados graças ao uso do SDumont pela comunidade científica e tecnológica nacional só pode ser mantida e expandida com investimentos sustentados, de longo prazo. Apesar da importância inequívoca do SDumont, uma infraestrutura de HPC, para um país tão grande, populoso e diverso como o Brasil, não pode se resumir a um único supercomputador. Essa infraestrutura deve ser dotada de supercomputadores em diferentes níveis de capacidade, com diferentes arquiteturas (inclusive inovadoras, não necessariamente produzidas em escala) e, sobretudo, com algum nível de distribuição geográfica, de modo a fomentar e apoiar o desenvolvimento de produtos e aplicações de HPC e a formação de recursos humanos especializados, considerando características e demandas regionais. Esse investimento é necessário para evitar a perda de talentos na área, para promover o florescimento de áreas correlatas (como a computação quântica), e para fortalecer o posicionamento do Brasil como um país de excelência na área.

O Brasil dispõe de um arcabouço formal para tal infraestrutura, o SINAPAD, estabelecido por Decreto Presidencial em 2004 e cuja coordenação foi delegada pelo MCTI ao LNCC em 2006. Na conformação inicial do sistema, 8 instituições de ensino e pesquisa nacionais foram selecionadas a participar como Centro Nacional de Processamento de Alto

Desempenho no Rio de Janeiro (CENAPAD-RJ) do SINAPAD, incluindo o próprio LNCC. A fragmentação excessiva do sistema dificulta, contudo, sua atualização periódica. Esses centros atendem hoje apenas precariamente suas respectivas regiões, com um conseqüente processo de “êxodo digital”: pequenos projetos migram para o SDumont, competindo por recursos computacionais com projetos estratégicos e de grande monta, como os oriundos do Sirius, a fonte de luz de 4ª geração do Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), ou urgentes, como aqueles relacionados à COVID-19. Além da necessária atualização tecnológica do SINAPAD, a sua composição e governança precisa ser mais integrada a nível nacional, com maior participação do MCTI e envolvendo mais proximamente academia e indústria, de forma a aumentar a eficácia do sistema.

Nossa visão é que um programa de investimentos sustentados para o SINAPAD, sob a coordenação do LNCC, permitirá aos pesquisadores e tecnólogos brasileiros, sejam eles da academia ou da indústria, abordar desafios econômicos, sociais, científicos e ambientais enfrentados pelo nosso País de forma muito mais eficaz, bem como posicionar o País na vanguarda do desenvolvimento científico e tecnológico mundial.

O aumento da capacidade computacional e de armazenamento dessa infraestrutura deve ser necessariamente acompanhado da habilitação dos usuários no emprego eficiente dos recursos computacionais. Essa exigência se intensifica nos limites alcançados hoje nas velocidades de processamento que, para tal, requer softwares e códigos para processamento paralelo e adequação às arquiteturas adotadas por diferentes modelos de processadores. A experiência de grandes centros de supercomputação em outros países (*National Center for Supercomputing Applications* (NCSA), *Lawrence Berkeley National Laboratory* (LBNL), *Texas Advanced Computing Center* (TACC) e *San Diego Supercomputer Center* (SDSC) nos Estados Unidos e *Barcelona Supercomputing Center* (BSC) e *Commissariat a l’Energie Atomique* (CEA) na União Europeia (UE), por exemplo) corrobora tal afirmação. Nesse sentido, justifica-se também o investimento contínuo no desenvolvimento de novos códigos e na otimização de códigos legados através do emprego de novas metodologias analíticas, matemáticas e computacionais apropriadas para as infraestruturas atual e de futuro do SINAPAD, em particular do LNCC. Justifica-se, ainda, uma maior aproximação do LNCC, a nível institucional, com as instituições usuárias do SINAPAD e do SDumont.

8.3 Linha de Ação de Formação de Recursos Humanos

Em consonância com o pilar estratégico de: “formação, atração e fixação de recursos humanos”, o LNCC oferece cursos de mestrado e doutorado à comunidade, além dos eventos de capacitação e de popularização da ciência.

8.3.1 Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC (PPG-LNCC)

A criação dos programas de mestrado e doutorado em Modelagem Computacional no LNCC (Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional do LNCC (PPG-LNCC)) contribui para a formação profissional num sentido amplo, bem como para a divulgação da Computação Científica e a inclusão social e digital. As áreas da fronteira conhecimento nas quais o Laboratório desenvolve pesquisas são fontes de inspiração para novos cursos de pós-graduação e escolas temáticas. Neste sentido, vale destacar o

papel do LNCC na criação dos cursos de pós-graduação em Modelagem Computacional da UFJF e, mais recentemente, na criação da pós-graduação multi-institucional em Nanobiosistemas (Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (Inmetro), Fundação Oswaldo Cruz (FIOCRUZ) e LNCC).

Desde seu início, o PPG-LNCC tem recebido alunos de várias áreas do conhecimento para o desenvolvimento das capacidades em modelagem computacional, dentro do contexto de pesquisas altamente interdisciplinares. O programa tem conceito seis (6) da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), que vem sendo mantido desde 2010. Em 2022, o PPG-LNCC conta com 65 alunos de doutorado e 25 de mestrado, e já formou, desde sua criação no ano 2000 até junho de 2022, 152 doutores e 198 mestres. Além do conceito seis (6) da CAPES, a qualidade do PPG-LNCC é também comprovada pela qualidade das teses, dissertações e publicações científicas e, principalmente, pela formação diferenciada de seus alunos e corpo docente.

O corpo docente do PPG-LNCC é altamente qualificado, o que se demonstra tanto por sua produção científica quanto pelo reconhecimento da comunidade científica nacional, via a concessão de bolsas de produtividade em pesquisa do CNPq. Os docentes contemplados com tal bolsa representam 62% do número total de membros do corpo docente permanente, sendo que 2/3 destes são bolsistas nível 1.

Egressos do programa ocupam posições permanentes em diversas universidades públicas, centros de pesquisas e em empresas no Brasil e no exterior. Nos seus 22 anos de existência o PPG-LNCC recebeu 23 distinções entre prêmios e menções honrosas em concursos patrocinados pela CAPES, CNPq, Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional (SBMAC), Associação Brasileira de Engenharia e Ciências Mecânicas (ABCM), Sociedade Brasileira de Computação (SBC), Associação Brasileira de Métodos Computacionais em Engenharia (ABMEC), Secretaria de Assuntos Estratégicos (SAE), *International Business Machines* (IBM), Secretaria de Ciência, Tecnologia e Inovação do Estado do Rio de Janeiro (SECTI-RJ). Em especial vale mencionar os 03 prêmios e as 03 menções honrosas de Melhor Tese da Área Interdisciplinar da CAPES.

Em conformidade com o descrito em Linha de ação de Pesquisa e Desenvolvimento, a formação do corpo docente deve ser orientada às demandas atuais e futuras do mercado de trabalho e do meio acadêmico, contemplando as novas áreas de pesquisa e desenvolvimento no contexto da modelagem computacional, tais como biodiversidade, bioinformática, biologia computacional, medicina assistida por computação científica e energia, dentre outras, tiveram grande desenvolvimento com a introdução de métodos de análise matemática, processamento digital, entre outras ferramentas. Assim, novas abordagens multidisciplinares foram incorporadas ao PPG-LNCC. Desse modo, objetiva-se ampliar a formação dos nossos mestres e doutores contemplando novas áreas de pesquisa e desenvolvimento, tais como modelagem computacional baseada em dados e IA, no contexto da modelagem computacional orientada para as novas demandas do mercado de trabalho, além do meio acadêmico. A consideração dessas novas áreas vai ao encontro da diversificação de áreas de atuação dos grupos de pesquisa do LNCC, e por consequência, do corpo docente. Sendo assim, será necessário aprimorar o conjunto de disciplinas e a estrutura da grade curricular de forma a melhor atender os alunos interessados em dar prosseguimento em dissertações e teses nessas novas áreas no contexto de modelagem

computacional, de forma a conciliar também com alunos interessados em desenvolver seus estudos nas áreas mais tradicionais do PPG-LNCC, mantendo a excelência que norteia as atividades da instituição.

8.3.2 Divulgação Científica

O Serviço de Comunicação Institucional (SECIN) atua em conformidade com o disposto no Inciso V, do art.5º do Regimento Interno, que compete ao LNCC a realização da difusão do conhecimento por meio de seminários, congressos, eventos científicos e cursos de extensão, dentre outros mecanismos, sendo a ação de promover a educação científica, a divulgação e popularização da ciência um dos objetivos estratégicos do planejamento estratégico do MCTI.

Para que seja possível estabelecer um canal de informações qualificadas para ampliar o acesso à ciência, tecnologia e inovação, o LNCC tem se dedicado à divulgação de suas pesquisas e a popularização da ciência e tecnologia, como um dos pilares de sua missão institucional. Desde 2020, devido à pandemia, essas atividades foram direcionadas para o ambiente virtual (Canal do Youtube, Instagram e Facebook), voltando aos poucos ao modo híbrido em 2022.

No período de 2019-2021 os eventos, cursos e seminários e colóquios do LNCC tiveram mais de 15.000 participantes, chamando a atenção para a série de 15 seminários em homenagem aos 40 anos do LNCC em 2020, onde os grupos de pesquisa da instituição apresentaram suas atividades. Além disso, aconteceram iniciativas de popularização da ciência, como a Semana Nacional de Ciência e Tecnologia (SNCT), atingindo aproximadamente 6.000 participantes, a maioria estudantes de ensino médio e fundamental.

9 Macroprocessos, Entregas e Avaliação

Em termos de organização, o LNCC tem a cadeia de valor mostrada na Figura 7.

10 Macroprocessos Finalísticos

Os macroprocessos finalísticos são acompanhados pelo TCG com indicadores cujas metas são acordadas com o MCTI anualmente.

10.1 Realizar Pesquisa, Desenvolvimento e Inovação - PD&I

Sobre as atividades de PD&I, a equipe de pesquisadores, tecnologistas e pós-doutorandos atua em projetos de pesquisa e na elaboração de artigos científicos avaliados por pares para publicação em revistas científicas indexadas.

Atualmente, Projetos de PD&I, Projetos por pesquisador e Artigos por pesquisador são as Figuras 8 a 10.

Figura 7: Cadeia de valor do LNCC - Macroprocessos.

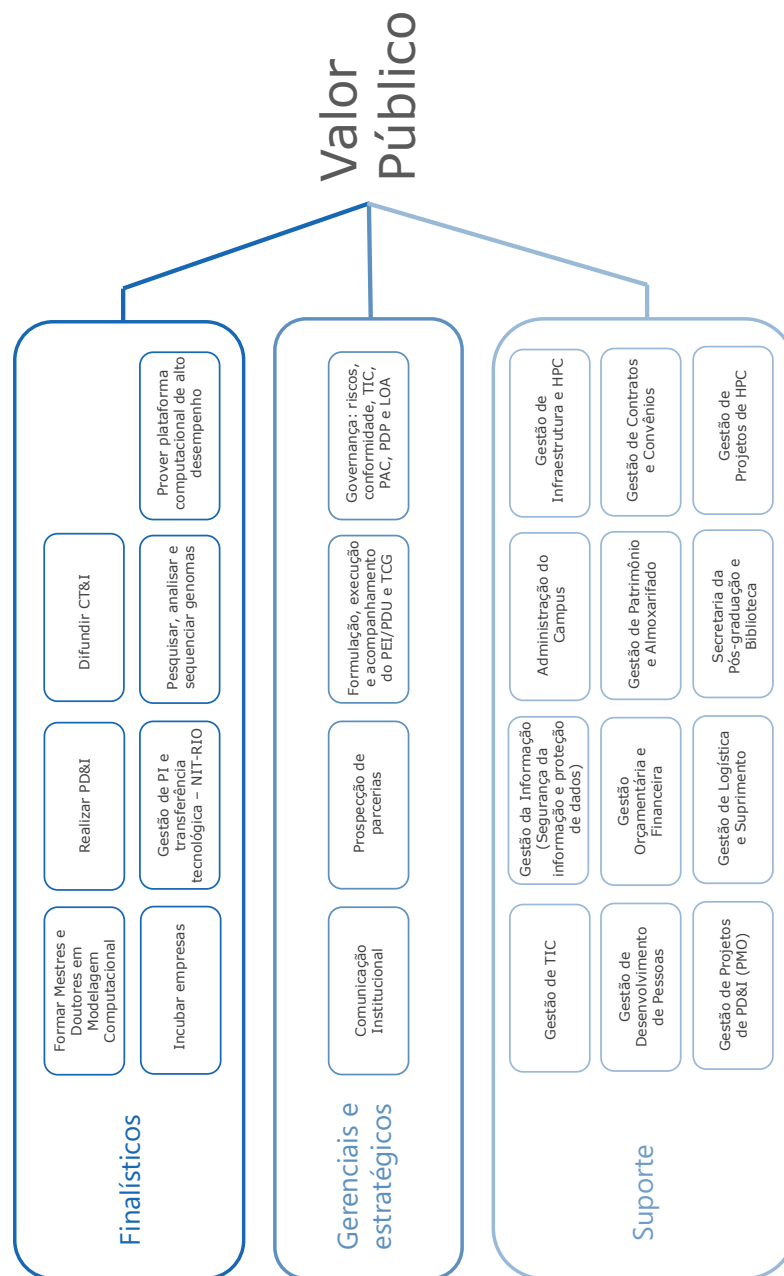


Figura 8: Projetos de PD&I.

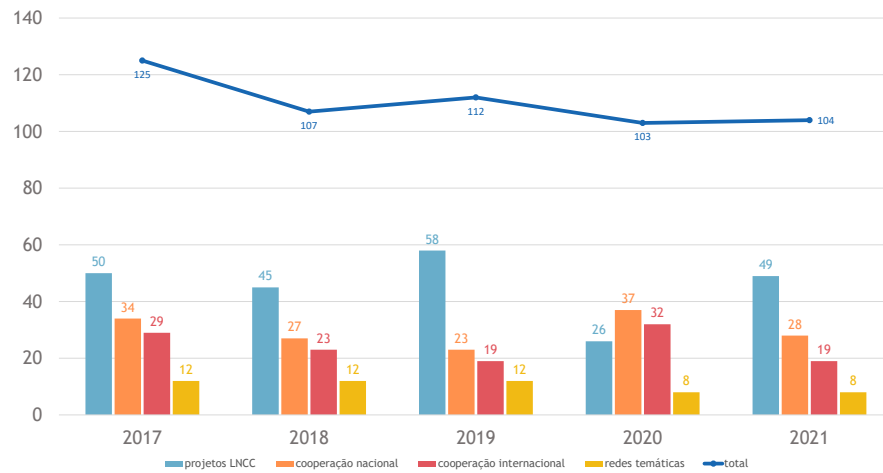


Figura 9: Projetos por pesquisador.

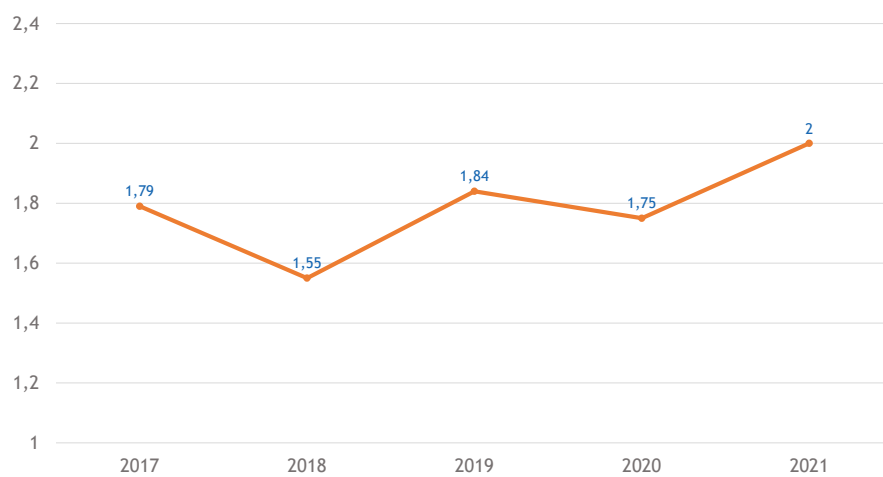
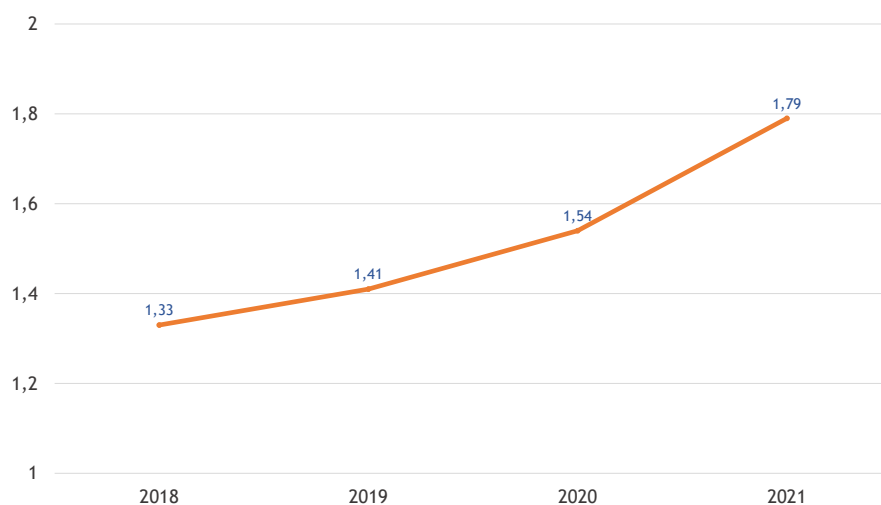
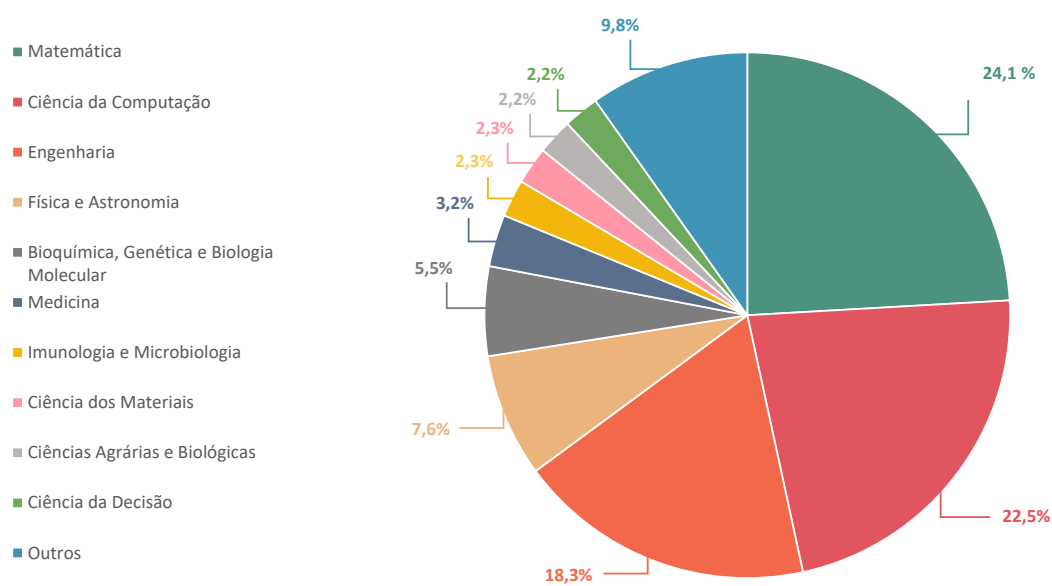


Figura 10: Artigos por pesquisador.



Também produziu e publicou artigos científicos em revistas indexadas nas seguintes áreas, conforme mostra a Figura 11.

Figura 11: Áreas de publicações do LNCC.



Fonte: scopus.com (consulta em 14 de fevereiro de 2022)

O desempenho é avaliado pelos indicadores informados na Tabela 4, que fazem parte do TCG.

Tabela 4: Indicadores de PD&I conforme o TCG 2022.

Indicador	Fatores
IPUB - Índice de Publicações	IPUB = NPSCI / TNSE NPSCI = Número de Publicações em Periódicos com ISSN e Indexados nas Bases WoS/SCI e SCOPUS TNSE = Técnicos de Nível Superior Vinculados à Pesquisa
NTPUB - Índice de Produtividade de Publicações por Autores	NTPUB = (NPSCI + Livros + capítulos de livros) / TNSE
PPCI - Programas e Projetos de Cooperação Internacional	PPCI = Número de programas e projetos vigentes em parceria formal com instituições estrangeiras vigentes no ano. No caso de organismos internacionais, será omitida a referência a País.
PPCN - Programas e Projetos de Cooperação Nacional	PPCN = Número de Programas e Projetos vigentes em parceria formal com instituições nacionais vigentes no ano.
TPER - Total de Projetos de P&D Envolvendo Redes Temáticas	TPER = Número de projetos em que o LNCC atua como coordenador ou participa na execução de projetos científicos e tecnológicos envolvendo redes nacionais e regionais de conhecimento e infraestrutura.
PPD - Projetos de Pesquisa Desenvolvidos	PPD = PROJ / TNSE PROJ = Total de Projetos Desenvolvidos

10.2 Difundir Ciência, Tecnologia e Inovação - CT&I

O impacto da pandemia nos anos de 2020 e 2021 direcionou as atividades de cursos, eventos e de popularização da ciência para o ambiente virtual, tendo favorecido a participação, provavelmente, pela facilitação do acesso remoto, independente da distância.

Atualmente, conforme mostra a Figura 12, são as seguintes estatísticas de difusão da ciência e tecnologia na sociedade:

O desempenho é avaliado pelos indicadores informados na Tabela 5, que fazem parte do TCG.

Figura 12: Participantes em eventos de difusão de CT&I.

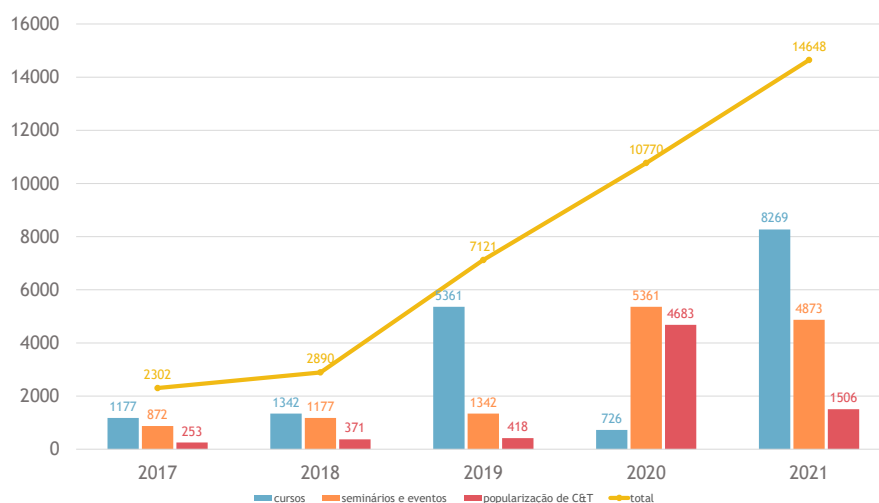


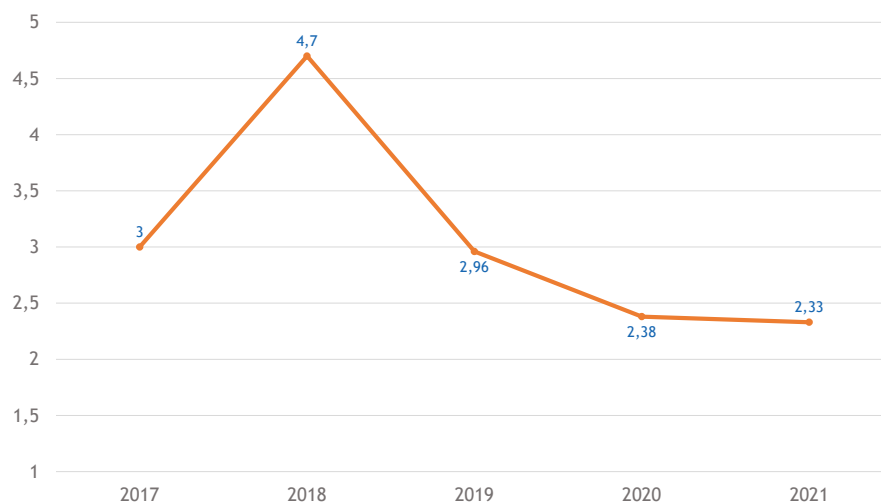
Tabela 5: Indicadores de difusão de CT&I conforme o TCG 2022.

Indicador	Fatores
NCC - Número de Certificados Concedidos	Número de certificados de especialização ou de extensão, tais como cursos de verão e outros cursos de extensão em área técnico-científica.
NCEC - Número de Certificados em Eventos Científicos	Número de registros de participação em eventos científicos, organizados pelo LNCC dentro de sua área de atuação, no ano, com ou sem concessão de certificados.
PEP - Participantes em Eventos de Popularização de Ciência, Tecnologia e Inovação	Total de participantes em eventos de popularização da ciência, organizados pelo LNCC, em eventos presenciais e em redes sociais

10.3 Formar Mestres e Doutores em Modelagem Computacional

Em 2021 a Pós-graduação em Modelagem Computacional do LNCC completou 21 anos de existência, mantendo desde 2010 o conceito seis (6), o mais alto dentre os Programas da área interdisciplinar da CAPES. A Figura 13 apresenta o índice de publicações desenvolvidas nas pesquisas de mestrado e de doutorado.

Figura 13: Índice de publicações relacionadas a teses e dissertações.



Embora tenham sido adotadas medidas de supervisão dos alunos, o entendimento é de que os indicadores de produção de teses e dissertações e de publicações somente se recuperarão após o retorno às atividades presenciais. Além do programa de pós-graduação em Modelagem Computacional, o corpo docente do LNCC participa dos dois seguintes programas de pós-graduação (orientando alunos e oferecendo cursos):

- Programa de pós-graduação em Nanobiosistemas (desde 2017), na área de concentração “Nanobiosistemas Aplicados à Saúde e Meio Ambiente” em colaboração com docentes do PPG-LNCC, da Universidade Federal do Rio de Janeiro (Campus de Xérem e Faculdade de Farmácia), do Inmetro e de BioManguinhos/FIOCRUZ;
- Rede Interativa de Pesquisa e Pós-Graduação em Conhecimento e Sociedade (RISC), em colaboração com as instituições: Universidade do Estado da Bahia (UNEB), Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Bahia (IFBA), Universidade Estadual de Feira de Santana (UEFS) e SENAI CIMATEC no Doutorado Multi-institucional e Multidisciplinar em Difusão do Conhecimento (DDMC) (<http://www.difusao.dmmdc.ufba.br/>). Esta colaboração tem mais de 15 anos.

O desempenho é avaliado pelos indicadores informados na Tabela 6, que fazem parte do TCG.

Tabela 6: Indicadores de pós-graduação conforme o TCG 2022.

Indicador	Fatores
PD - Número de Pós-doutorandos	PD = Número de pós-doutorandos no ano.
IODT - Índice de Orientação de Dissertações e Teses Defendidas	$\text{IODT} = (\text{NDT} * 2 + \text{NDM}) / (\text{NOD} * 2 + \text{NOM})$ <p>NDT = Número de Teses de Doutorado no ano. NDM = Número de Dissertações de Mestrado no ano. NOD = Número de Membros do Corpo Docente Habilitados a Orientar Teses de Doutorado NOM = Número de Membros do Corpo Docente Habilitados a Orientar Somente Dissertações de Mestrado</p>
TPTD - Trabalhos Publicados por Teses e Dissertações Defendidas - Trabalhos publicados por teses e dissertações defendidas	$\text{TPTD} = \text{NTP} / (\text{NDT} + \text{NDM})$ <p>NTP = Número de artigos completos publicados ou aceitos para publicação em periódicos indexados ou artigos completos publicados em anais de congressos, gerados a partir das teses e dissertações defendidas ou em andamento. No caso das teses e dissertações defendidas, serão consideradas as publicações vinculadas às teses ou dissertações defendidas do programa de pós-graduação até dois anos após a conclusão.</p>

10.4 Prover Plataforma Computacional de Alto Desempenho

Desde 2020, o LNCC tem a certificação ISO 27.001 do sistema de segurança da informação e houve a iniciativa de projeto piloto do Comitê de Governança de TIC, por orientação do TCU.

O SDumont permaneceu na lista dos 500+ e, embora tenha perdido posições, permanece como o mais potente disponível à comunidade científica brasileira. Buscando sua atualização, foi preparado projeto e registrado no sistema SIGE3P do MCTI, embora não tenham sido encontrados recursos para o projeto. As Figuras 14 e 15 apresentam os

dados de HPC.

Atualização, especialmente contemplando capacidade em computação quântica para fins de pesquisa e treinamento, é necessária para garantir a autonomia nacional, o reconhecimento internacional e a participação em cooperações internacionais.

Figura 14: Número de projetos de HPC

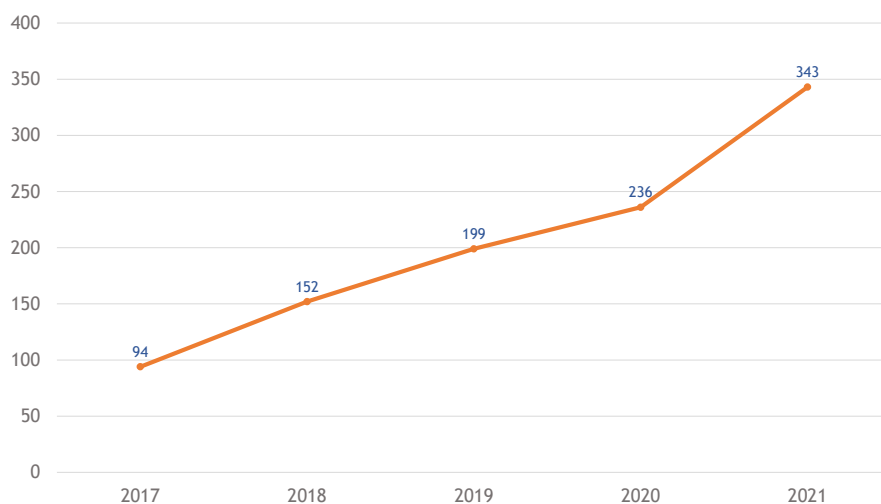
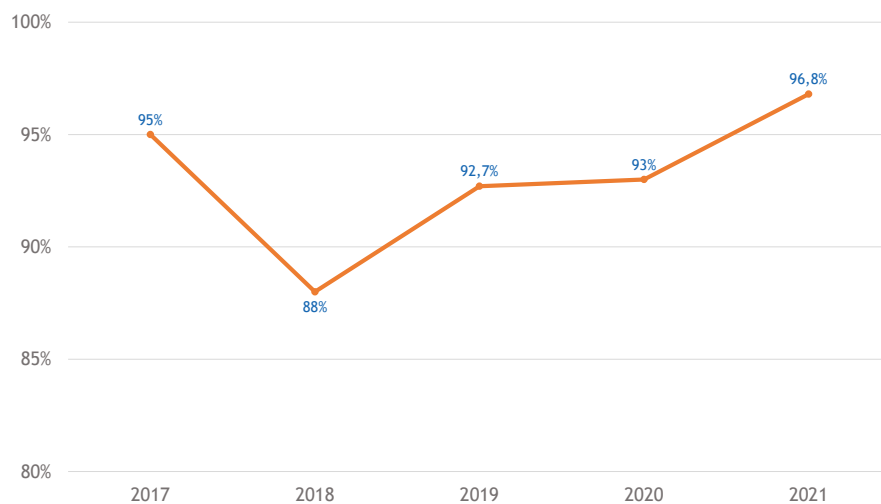


Figura 15: Tempo disponível do SDumont.



O desempenho é avaliado pelos indicadores informados na Tabela 7, que fazem parte do TCG.

Tabela 7: Indicadores de HPC conforme o TCG 2022.

Indicador	Fatores
UPC - Unidade de Plataforma Computacional	UPC = Número de horas de CPU utilizadas pelos processos (Jobs) dos usuários, em milhares de horas.
DiPC - Disponibilidade da Plataforma Computacional	DiPC = NHD / NHP NHD = Número de horas realmente disponíveis da plataforma computacional. NHP = Número de horas de disponibilidade prevista da plataforma computacional.
IO - Índice de Ocupação da Plataforma <i>High Performance Computing</i>	IO = UPC / NHD
NPAe - Número de Projetos Utilizando <i>High Performance Computing</i>	NPAe = Projetos que foram executados e aqueles que foram aprovados e foram considerados no planejamento de uso da plataforma.
SADC - Softwares Aplicativos Disponíveis à Comunidade	SADC = Número de sistemas de softwares e portais desenvolvidos e mantidos no LNCC, com um propósito determinado e distinto, e cuja utilização esteja franqueada a comunidade científica e de pesquisa. Engloba tanto softwares novos disponibilizados no ano de avaliação quanto softwares que tenham sido desenvolvidos em anos anteriores e que estejam sendo mantidos em perfeitas condições de funcionamento.

10.5 Pesquisar, Analisar e Sequenciar Genomas

Nos últimos 2 anos, a equipe do LABINFO entregou mais de 6.000 análises e sequenciamentos de genomas apoiando o esforço de prevenção e combate à COVID-19.

Nas Figuras 16 e 17, os resultados de 2021 foram fortemente afetados por análises de sequenciamento para a pandemia de COVID-19 no Brasil.

O desempenho do LABINFO é avaliado pelos indicadores informados na Tabela 8, que fazem parte do TCG.

Figura 16: Genomas analisados pelo LABINFO.

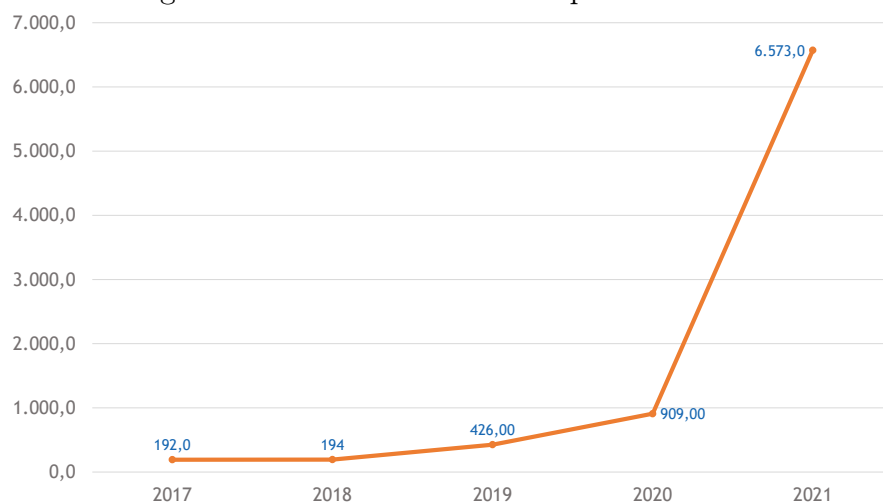


Figura 17: Genomas sequenciados pelo LABINFO.

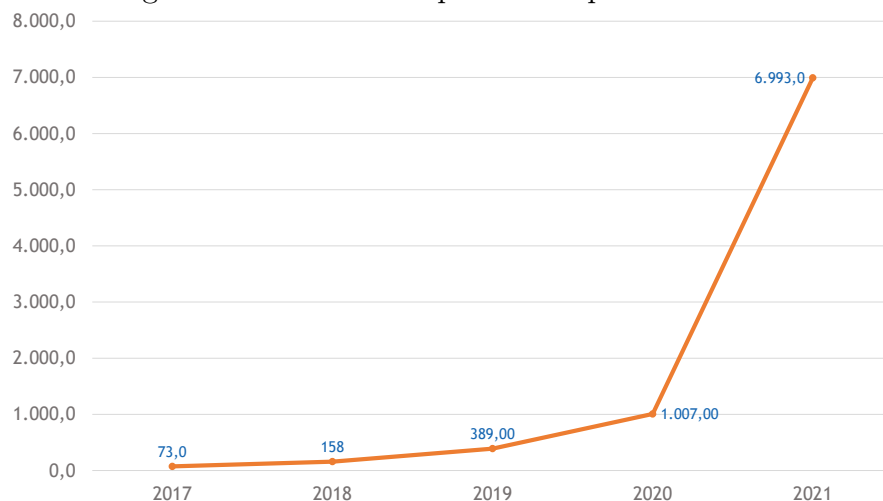


Tabela 8: Indicadores de bioinformática conforme o TCG 2022.

Indicador	Fatores
NGA - Número de Genomas Analisados	NGA = Número de Genomas Analisados no ano.
NGS - Número de Genoma Sequenciados	NGS = Número de Genoma Sequenciados na Unidade Genômica Computacional, no ano.

10.6 Gestão de PI e Transferência Tecnológica - NIT-Rio

O LNCC participa do NIT-Rio, que tem o papel de gerir a propriedade intelectual produzida – em especial registros de softwares e depósitos de patentes. Em seus anos de existência, o LNCC alcançou 04 patentes depositadas, 05 softwares depositados e 06

softwares concedidos.

10.7 Incubação de Empresas

A Incubadora de empresas do LNCC opera com edital contínuo para a adesão de empresas de base tecnológica.

Criada em 2005, já passaram pela Incubadora do LNCC 19 empresas, tendo 12 graduados desde então, se encontrando 3 residentes e 1 aprovada para iniciar atividades ainda em 2022. Portadora dos certificados de Credenciamento de Instituições junto ao Comitê da Área de Tecnologia da Informação (CATI), para fins da LEI de Informática, e com certificação do Centro de Referência para Apoio a Novos Empreendimentos (CERNE), a Incubadora tem seu papel reconhecido pela sociedade, evidenciado pela aprovação em editais da FAPERJ.

Levantamento da Incubadora aponta que as empresas residentes em 2022 ocupam 23 trabalhadores e as empresas graduadas geram mais de 100 empregos diretos.

11 Demais Macroprocessos

A Tabela 9 apresenta os indicadores do TCG de acompanhamento dos demais macroprocessos.

Tabela 9: Indicadores de outros macroprocessos do LNCC conforme TCG 2022.

Indicador	Fatores
RREO - Relação entre Receita Própria, Extraorçamentária e Dotação Orçamentária Aprovada na Lei Orçamentária Anual	RREO = $[RE / (RE+OCC)] * 100$ OCC = Dotação Orçamentária Aprovada na Lei Orçamentária Anual RE = Receita Extraorçamentária
IEO - Índice de Execução Orçamentária	IEO = $VOE / LEA * 100$ VOE = Recursos de Custeio e Capital Provenientes do Tesouro Nacional LEA - Limite de Empenho do Orçamento Autorizado
IEPCI - Índice de Execução dos Recursos do Programa de Capacitação Institucional	IEPCI = Valor dos recursos executados do Programa PCI / valor dos recursos PCI disponíveis
ICT - Instituto de Ciência e Tecnologia	ICT = $(ACT / OCC) * 100$

	ACT = Recursos Financeiros Aplicados em Capacitação e Treinamento
PRB - Participação Relativa de Bolsistas	$\text{PRB} = \left[\frac{\text{NTB}}{\text{NTS} + \text{NTB}} \right] * 100$
	NTB = Número Total de Bolsistas
	NTS = Número Total de Servidores
PRPT - Participação Relativa de Pessoal Terceirizado	$\text{PRPT} = \left[\frac{\text{NPT}}{\text{NTS} + \text{NPT}} \right] * 100$
	NPT = Quantitativo máximo de pessoal terceirizado durante o período de análise.
IPCI - Índice de Bolsistas de Programa de Capacitação Institucional	$\text{IPCI} = \frac{\text{Número de bolsistas PCI}}{\text{NTB}}$

12 Acompanhamento e Revisão

Este PDU deve ter seus indicadores acompanhados conforme o Plano de Gestão de Indicadores, de forma a serem adotadas ações para o alcance das metas acordadas no Termo de Compromisso de Gestão Anual.

Além desse acompanhamento, o CPFRH contribuirá para a implementação e avaliação dos resultados das ações estratégicas previstas na Seção 5

Anualmente, por época da elaboração e aprovação do Relatório Anual do TCG, será avaliada pelo CTC do LNCC a necessidade de revisão deste PDU.