

Estudo Técnico Preliminar 15/2024

1. Informações Básicas

Número do processo: 01209.000206/2024-41

2. Descrição da necessidade

2.1. O Estudo Técnico Preliminar tem por objetivo identificar e analisar os cenários para o atendimento da demanda que consta no Documento de Oficialização da Demanda (**SEI 12136168**), bem como demonstrar a viabilidade técnica e econômica da solução identificada, fornecendo as informações necessárias para subsidiar o respectivo processo de contratação, em consonância com a Instrução Normativa SEGES Nº 94, de 23 de dezembro de 2022.

2.2. A descrição dos bens a serem adquiridos neste processo contém as especificações necessárias e suficientes para garantir a qualidade da contratação e atendimento às necessidades técnicas de disponibilidade, acessibilidade e qualidade para o LNCC, não constando condições que comprometam o objetivo da contratação, sendo também observadas as normas e referências existentes aplicáveis ao objeto.

2.3. Sendo a evolução tecnológica e mercadológica uma constante, com várias opções que visam atender da melhor forma as demandas de mercado, o presente estudo tem por finalidade analisar solução de TIC disponível no mercado objetivando o atendimento da demanda do LNCC, para disponibilização de aplicativo que auxilie no desenvolvimento de pesquisas que são realizadas na Coordenação de Modelagem Computacional - COMOD, sob a responsabilidade do pesquisador Laurent Emmanuel Dardenne.

2.4. Justificativa da contratação

A necessidade de uso deste software foi verificada ao estudarmos como explorar as novas bibliotecas comerciais (ex, REAL Space da empresa Enamine e Galaxi) de moléculas virtuais contendo até trilhões de compostos, que estão disponíveis comercialmente e possuem alta probabilidade de acessibilidade sintética. O infiniSee é uma das melhores ferramentas capazes de navegar em espaços químicos, encontrar moléculas análogas com similaridades químicas e/ou topológicas. Essa ferramenta permitirá aos projetos desenvolvidos no LNCC construir e investigar bibliotecas contendo milhões/bilhões de compostos focadas nos resultados de atracamento molecular para um determinado alvo molecular. É importante ressaltar que, com o novo upgrade do software (i.e., infiniSee xREAL), é possível investigar um imenso espaço químico de 2,4 trilhões de moléculas. Após serem identificadas, as moléculas mais promissoras poderão ser facilmente compradas e posteriormente testadas experimentalmente.

O software InfiniSee space navigation busca (i.e, FTrees scaffold hopping, SpaceLight analog hunting e SpaceMACS motif matching), incluindo o upgrade infiniSee xREAL, com acesso a uma máquina desktop, se insere no contexto do desenvolvimento da linha de pesquisa do LNCC em Planejamento de novos Fármacos.

2.5. Da classificação dos Bens comuns

2.5.1. A natureza do objeto que será adquirido enquadra-se na classificação de bens comuns, nos termos do art. 6º, inciso XIII, da Lei 14.133 de 1 de abril de 2021: “*bens e serviços comuns: aqueles cujos padrões de desempenho e qualidade podem ser objetivamente definidos pelo edital, por meio de especificações usuais de mercado;*”.

2.5.2. O objeto desta contratação não se enquadra como sendo bem de luxo, conforme Decreto nº 10.818, de 27 de setembro de 2021.

2.6. A presente demanda está devidamente prevista nos instrumentos de planejamento do LNCC, conforme as informações a seguir:

Alinhamento ao PCA 2024

Número do Documento de Formalização de Demanda: DFD 11/2023
Uma licença temporária de três anos para uma máquina servidor (com uso de até 10 licenças simultâneas), contendo dois mecanismos de t (FTrees e SpaceLight)
Imprescindível para o desenvolvimento de técnicas de IA e triagem virtual de milhões de moléculas para pesquisa de antibióticos contra bactérias resistentes e para o uso do portal DockThor em pesquisas em Nanotecnologia

Plano Diretor de Tecnologia da Informação e Comunicações 2024-2025 - Pág.68/70

tabela 17 – Aquisição de licenças de software

N08-A08 - Elaborar licitações para contratação de licenças de softwares, para atender as demandas atuais e futuras de todas as áreas da instituição. Os itens a serem contratados são listados na tabela 17 – Aquisição de licenças de software				
Ações Relacionadas	Descrição	Tipo	Quant	Valor Estimado 2024
N08-A08	Licença do software infinisee da Biosolvolt	Custeio	1	R\$46.000,00

2.7. Tratando-se de uma solução de TIC, o conteúdo deste documento tem como norma orientativa a Instrução Normativa SGD/ME nº 94/2022, a qual descreve todas as etapas necessárias para a formalização da contratação.

Referência:

Artigo 9 da IN SGD/ME nº 94, de 23 de dezembro de 2022:

“Art. 9º A fase de Planejamento da Contratação consiste nas seguintes etapas:

I - instituição da Equipe de Planejamento da Contratação;

II - elaboração do Estudo Técnico Preliminar da Contratação; e

III - elaboração do Termo de Referência.

§ 1º Salvo nas situações tratadas § 1º do art. 1º desta Instrução Normativa, é obrigatória a execução de todas as etapas da fase de planejamento da Contratação, independentemente do tipo de contratação, inclusive nos casos de:

I - inexigibilidade; (grifo nosso)

II - dispensa de licitação ou licitação dispensada;

III - formação de Ata de Registro de Preços;

IV - adesão à Ata de Registro de Preços;

V - contratações com uso de verbas de organismos nacionais ou internacionais; ou

VI - contratação de empresas públicas de TIC."

BREVE HISTÓRICO

A solução de TIC, objeto do presente estudo está enquadrada como "Produto de pesquisa e desenvolvimento". Por esta razão, foi identificada a viabilidade de contratação do objeto por meio das regras previstas no Marco Legal de Ciência, Tecnologia e Inovação.

Em 11 de janeiro de 2016, foi sancionada a Lei nº 13.243, que dispõe sobre os estímulos ao desenvolvimento científico, à pesquisa, à capacitação científica e tecnológica e à inovação. Dentre os princípios constantes no parágrafo único do artigo 1º da citada lei, relevante destacar a redação do inciso XII, a seguir transcrito:

"Art. 1º Esta Lei estabelece medidas de incentivo à inovação e à pesquisa científica e tecnológica no ambiente produtivo, com vistas à capacitação tecnológica, ao alcance da autonomia tecnológica e ao desenvolvimento do sistema produtivo nacional e regional do País, nos termos dos arts. 23, 24, 167, 200, 213, 218, 219 e 219-A da Constituição Federal.

*Parágrafo único. As medidas às quais se refere o **caput** deverão observar os seguintes princípios:*

.....

XII - Simplificação de procedimentos para a gestão de projetos de controle por resultados em sua avaliação;"

A ciência e tecnologia brasileira possui, ainda, uma grande dependência de insumos disponibilizados no exterior para a execução das diversas atividades de pesquisa científica, cujo acesso era deveras complexo, com as exigências da legislação que trata das contratações públicas, neste caso a Lei nº 14.133/2021. de ciência, tecnologia e inovação e adoção

O Marco Legal de CT&I é o esforço governamental para que as atividades de ciência, tecnologia e inovação que são de extrema importância para as atividades desempenhadas pelas Instituições de Ciência e Tecnologia - ICT, tenham um tratamento diferenciado com o intuito de alavancar a pesquisa científica no país.

Promulgada a Lei nº 13.243, 11 de janeiro de 2016, houve a necessidade de regulamentação de diversos dispositivos da mesma.

Para tanto, foi editado o Decreto nº 9.283, de 07 de fevereiro de 2018, com o estabelecimento das medidas de incentivo à inovação e à pesquisa científica e tecnológica no ambiente produtivo, com vistas à capacitação tecnológica, ao alcance da autonomia tecnológica e ao desenvolvimento do sistema produtivo nacional e regional.

No decreto, em seu capítulo VIII, são tratados os procedimentos para "Contratação de produtos para pesquisa e desenvolvimento".

As dificuldades para a contratação de bens e serviços para pesquisa e desenvolvimento, com fornecedores do exterior, sempre foi uma grande dificuldade para a área de contratações. Da leitura do citado capítulo, houve um grande avanço no sentido de alavancar estas contratações, com a simplificação de procedimentos, principalmente no que se refere à apresentação de documentos obrigatórios, em conformidade com a Lei nº 14.133/2021.

A Advocacia Geral da União - AGU, por meio da Câmara Permanente da Ciência e Tecnologia e Inovação - CP-CT&I da Procuradoria-Geral da União, buscando orientar as ICTS para a efetiva utilização do disposto no Decreto nº 9.283, de 2018, elaborou o Parecer nº 00002/2019/CP-CT&I/PGF/AGU, cujo conteúdo foi anexado ao processo (**SEI 12277945**).

Tendo como parâmetro as orientações contidas no parecer referenciado, o presente estudo será conduzido de forma a demonstrar o adequado enquadramento do objeto que é para o fornecimento de serviços de cessão de uso de licença de software denominado "InfiniSee", cuja contratação é de produto para pesquisa e desenvolvimento, conforme já mencionado.

Por fim, o detalhamento da presente contratação será apresentado nos tópicos deste Estudo Técnico Preliminar.

3. Área requisitante

Área Requisitante	Responsável
Coordenação de Modelagem Computacional - COMOD	Laurent Emmanuel Dardene

4. Necessidades de Negócio

4.1. Para o alcance dos objetivos deste estudo, as necessidades de negócios se apresentam como de grande importância para o êxito da contratação, onde serão abordados aspectos relevantes da solução a ser fornecida.

A Coordenação de Modelagem Computacional (COMOD), desenvolve diversos projetos visando a construção e preparação de moléculas, a análise de interações intermoleculares, a configuração e preparação de experimentos de ancoramento molecular e a realização de cálculos objetivando a predição de diversas propriedades associadas tanto aos ligantes, quanto às moléculas consideradas alvos terapêuticos. A execução destas atividades necessita da utilização de ferramentas, visando o planejamento de novos fármacos. O software infinisee da BiosolveIT (<https://www.biosolveit.de/products/infinisee/>) permite a busca por similaridade molecular de novas moléculas em bases de dados comerciais contendo dezenas de bilhões de moléculas virtuais ("make on demand").

Conforme destacado anteriormente, o uso deste software permite a exploração de novas bibliotecas comerciais (ex, REAL Space da empresa Enamine e Galaxi) de moléculas virtuais contendo trilhões de compostos. Estes compostos estão disponíveis comercialmente e possuem alta probabilidade de acessibilidade sintética.

A aquisição da licença do software Infinisee, se insere no contexto do desenvolvimento da linha de pesquisa do LNCC em Planejamento de novos fármacos. Esta é uma linha de pesquisa estratégica do LNCC, estando contemplada no PDU 2023-2027 na parte de pesquisas aplicadas com impacto tecnológico e de inovação.

5. Necessidades Tecnológicas

5.1. A linha de pesquisa do LNCC em Planejamento de novos fármacos está associada ao desenvolvimento dos seguintes projetos de pesquisa:

1) Desenvolvimento de pesquisas aplicadas na área de desenvolvimento de novos fármacos.

Desenvolvimento de:

- (i) novos inibidores das enzimas associadas ao desenvolvimento de processos inflamatórios e cancerígenos;
- (ii) novos inibidores de proteínas consideradas como alvos moleculares para o tratamento de doenças ditas negligenciadas (e.g., parasitas causadores da Doença de Chagas, Leishmaniose e Esquistossomose);
- (iii) novos compostos promissores para o tratamento da Doença de Alzheimer.

Estas pesquisas aplicadas envolvem colaborações com pesquisadores da área experimental da FIOCRUZ/RJ, INCT-INOVAR, USP, UNIFAL/MG e UFRGS. A colaboração com o prof. Marco Ceschi do Instituto de Química da UFRGS inclusive teve como consequência o depósito (entre 2105 e 2022) de oito patentes no INPI de moléculas promissoras para o tratamento da Doença de Alzheimer (patentes divididas entre o LNCC e a UFRGS).

2) Desenvolvimento dos projetos, coordenados pelo pesquisador prof. Laurent Emmanuel Dardenne:

- (i) "Desenvolvimento de ferramentas e ambientes computacionais para o planejamento de novos fármacos contra patógenos clínicos suportados por técnicas de Inteligência Artificial" aprovado pela FAPERJ (E-26/211.357/2021) no Edital de Projetos Temáticos 2021, com vigência de quatro anos (até 2026);
- (ii) "Desenvolvimento de Ferramentas e Ambientes Computacionais para o Planejamento de Novos Fármacos Suportado por Técnicas de Inteligência Artificial" aprovado pela FAPERJ (E-26/200.393/2023) no Edital FAPERJ Cientista do Nosso Estado, com vigência de três anos (até final de 2026).

Estes projetos envolvem o desenvolvimento de novas metodologias para o planejamento de novos fármacos utilizando técnicas modernas de Inteligência Artificial e a consequente aplicação destas no planejamento de novos fármacos contra alvos terapêuticos associados à resistência bacteriana e ao vírus SARS-CoV-2. Estas pesquisas também envolvem colaborações com grupos experimentais brasileiros da química medicinal.

No LNCC, os seguintes pesquisadores estão envolvidos com o resultado do uso do software infiniSee:

- Laurent Emmanuel Dardenne, pesquisador tecnologista, coordenador dos projetos citados;
- Marisa Fabiana Nicolas, pesquisadora colaboradora em projetos focando no desenvolvimento de fármacos antimicrobianos;
- Isabella Alvim Guedes, pesquisadora colaboradora em projetos focando no desenvolvimento de fármacos.

Sendo assim, os projetos mencionados serão beneficiados pela compra desse software, envolvendo o desenvolvimento de técnicas de IA e triagem virtual de milhares

a milhões de moléculas para pesquisa de antibióticos contra bactérias resistentes e para o uso do portal DockThor em pesquisas em Nanotecnologia.

6. Demais requisitos necessários e suficientes à escolha da solução de TIC

6.1. O infiniSee é uma ferramenta capaz de navegar em espaços químicos, encontrar moléculas análogas com similaridades químicas e/ou topológicas. Esta ferramenta permitirá aos projetos desenvolvidos no LNCC, construir e investigar bibliotecas contendo milhões/bilhões de compostos focadas nos resultados de atracamento molecular para um determinado alvo molecular. Após serem identificadas, as moléculas mais promissoras poderão ser facilmente compradas e posteriormente testadas experimentalmente.

6.2. O Parcelamento da solução não é aplicável a presente demanda, tendo em vista que se trata de uma contratação direta (dispensa de licitação), onde está constatada a inviabilidade de competição, pois o fornecimento será realizado pelo desenvolvedor do software.

6.3. Não é admitida a subcontratação do objeto contratual.

7. Estimativa da demanda - quantidade de bens e serviços

7.1. A presente seção contém o registro do quantitativo estimado de bens/serviços necessários para a composição da solução a ser contratada, de forma detalhada. A demanda prevista contempla o atendimento da necessidade atual.

Item	Descrição	Quantidade	Valor unitário estimado	Valor total estimado
1	Contratação de empresa para fornecimento de licença, com direito de uso e subscrição temporária de 36 (trinta e seis) meses – do Software Infinisee, contendo 3 (três) mecanismos de busca (FTrees, Space Light e spaceMACS) e o upgrade infiniSee xREAL	1	R\$ 29.829,74	R\$ 29.829,74
			Total Geral	R\$ 29.829,74

7.2. A compra de uma licença de três anos (36 meses) do software InfiniSee space navigation busca (i.e, FTrees scaffold hopping, SpaceLight analog hunting e SpaceMACS motif matching), incluindo o upgrade infiniSee xREAL, com acesso a uma máquina desktop, se insere no contexto do desenvolvimento da linha de pesquisa do LNCC em Planejamento de novos Fármacos.

8. Levantamento de soluções

8.1. Conforme já informado anteriormente, o Software InfiniSee da BiosolveIT é o único que atende plenamente às necessidades dos projetos desenvolvidos pelos pesquisadores do LNCC.

8.2. Cabe ressaltar, também, que não existem softwares livres (<http://www.softwarepublico.gov.br/ListaSoftwares>), tampouco softwares de mercado que possibilitem o desenvolvimento de pesquisas aplicadas na área de desenvolvimento de novos fármacos com a sofisticação metodológica, nem com características semelhantes presente no software descrito.

9. Análise comparativa de soluções

9.1. Conforme os estudos realizados e o histórico relativo ao objeto, o software InfiniSee da BiosolveIT é o único que atende às necessidades da Coordenação de Modelagem Computacional - COMOD, cuja utilização por parte da equipe de pesquisadores evidencia o atendimento dos objetivos propostos para o desenvolvimento de técnicas de IA e triagem virtual de milhões de moléculas para pesquisa de antibióticos contra bactérias resistentes e para o uso do portal DockThor em pesquisas em Nanotecnologia.

Por esta razão, não há como realizar a análise comparativa de soluções, restando prejudicada pela inexistência de soluções que atendam à demanda do objeto do presente estudo.

10. Registro de soluções consideradas inviáveis

10.1. Pela identificação de somente uma solução que atende ao objeto do presente estudo, não houve a possibilidade de registro de soluções consideradas inviáveis, conforme os relatos presentes nos tópicos deste estudo.

11. Análise comparativa de custos (TCO)

11.1. Tendo em vista que somente a solução objeto do presente possui as condições de atendimento das necessidades do LNCC, não há como realizar a análise comparativa de custos.

12. Descrição da solução de TIC a ser contratada

12.1. A contratação da solução do software InfiniSee space navigation, pelo período de 36 (trinta e seis) meses e tem por objetivo dar suporte às pesquisas aplicadas ao desenvolvimento de novos fármacos.

13. Estimativa de custo total da contratação

Valor (R\$): 29.829,74

13.1. Por tratar-se de uma solução que será adquirida diretamente com o desenvolvedor, cuja sede está estabelecida na Alemanha, o valor é cotado em dólar, devendo ser realizada a devida conversão.

A proposta Quote No. 201024_15 (SEI 12384578), traduzida no documento SEI nº 12370032, tendo sido encaminhada pela empresa BiosolveIT GmbH, em 20/10/2024, tem o valor total de USD 6.900.00 (seis mil e novecentos dólares americanos) pelo período de 36 (trinta e seis) meses.

Vale destacar que na proposta Quote No. 201024_15 (SEI 12384578), apresenta-se desconto de 25% no valor total, ou seja, U\$ 1.725,00 (mil setecentos e vinte e cinco dólares), caso a contratação seja concluída até 15/11/2024.

Portanto, o custo estimado para esta contratação, é de **R\$ 29.829,74 (vinte e nove mil oitocentos e dezessete reais e sessenta centavos)**. A conversão foi realizada pela cotação do dólar em 07/11/2024, apurada em consulta na página do Banco Central do Brasil (SEI 12384533).

Outrossim, conforme documento anexado ao SEI nº 12384629, traduzido no documento SEI nº 12370032 e enviado em 21 de setembro de 2024, a empresa esclarece:

“A BioSolveIT GmbH, no endereço indicado acima, é a desenvolvedora, proprietária ou legítima licenciada e única fornecedora das plataformas SeeSAR, infiniSee e HPSee. Através desta carta, informamos que a BioSolveIT vende seus produtos de software diretamente para os usuários finais, e não há revendedores ou outros canais de venda disponíveis, exceto para regiões específicas da Ásia. Além disso, a BioSolveIT não possui outro representante no Brasil.”.

Da mesma forma, em mensagem anexada à citada proposta Quote No. 201024_15 (SEI 12384578), traduzida no documento SEI nº 12370032, em relação ao preço proposto, esclarece:

“Confirmamos, por meio desta, que o preço oferecido acima é comparável ao preço normalmente oferecido a universidades e, portanto, atende ao nível mais alto de desconto com base na classificação do cliente. Devido ao desconto adicional concedido, o preço final é ainda mais baixo.”.

14. Justificativa técnica da escolha da solução

14.1. A contratação da solução do software InfiniSee space navigation com três modos de busca (i, e, FTrees scaffold hopping, SpaceLight analog hunting e SpaceMACS motif matching), incluindo o upgrade infiniSee xREAL, com acesso a uma máquina desktop, se insere no contexto do desenvolvimento da linha de pesquisa do LNCC em Planejamento de novos Fármacos. Estando associado ao desenvolvimento dos projetos de pesquisa listados anteriormente.

15. Justificativa econômica da escolha da solução

15.1. A escolha da solução está baseada na sua aplicabilidade às necessidades já apresentadas neste estudo técnico e, principalmente nas informações constantes no tópico 13 deste documento.

15.2. Com relação à justificativa econômica da escolha da solução, foi solicitada à empresa o envio de documentação comprobatória de que o valores ofertados na cotação de preços encaminhada era compatível com os valores praticados no mercado. A empresa encaminhou a sua lista de preços oficiais, onde ficou demonstrado que na proposta do LNCC para o pacote de aplicativos foi concedido um desconto em torno de 25% em relação à proposta oficial da empresa.

15.3. Desta forma, consideramos a vantajosidade da presente contratação no que se refere ao aspecto econômico.

16. Benefícios a serem alcançados com a contratação

- 1- Planejamento e patenteamento de novas moléculas promissoras para o tratamento da doença de Alzheimer.
- 2- Planejamento e patenteamento de novas moléculas promissoras para o tratamento da COVID-19.
- 3- Planejamento e patenteamento de novas moléculas promissoras para o tratamento de doenças relacionadas com resistência bacteriana.
- 4- Planejamento e patenteamento de novas moléculas promissoras para o tratamento de doenças ditas negligenciadas (e.g., Doença de Chagas, Leishmaniose e Esquistossomose).

17. Providências a serem Adotadas

17.1. Não há providências a serem adotadas para a sua implementação, nem adaptações da infraestrutura para o seu adequado funcionamento.

18. Contratações correlatas / interdependentes

18.1. Não se verifica contratações correlatas nem interdependentes para a viabilidade e contratação desta demanda;

19. Declaração de Viabilidade

Esta equipe de planejamento declara **viável** esta contratação.

19.1. Justificativa da Viabilidade

Declaramos que a contratação objeto do presente estudo é viável, tendo em vista as condições apresentadas neste documento, onde foi demonstrada a viabilidade técnica e econômica para o prosseguimento da contratação, assim como sua relevância para as atividades de pesquisa aplicadas na área de desenvolvimento de fármacos.

20. Responsáveis

Todas as assinaturas eletrônicas seguem o horário oficial de Brasília e fundamentam-se no §3º do Art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

LAURENT EMMANUEL DARDENNE

Integrante Requisitante

MARITA CAMPOS MAESTRELLI

Integrante Técnico

NATASCHA CONSTANT DE ALMEIDA DOS SANTOS BRAGA

Integrante Administrativo

WAGNER VIEIRA LEO

Autoridade Máxima da Área de TIC