

ANEXO 3 : Modelo do Plano de Trabalho

PROGRAMA FUTURAS CIENTISTAS 2023

PLANO DE TRABALHO

Modelagem Computacional na Educação Básica: o desenvolvimento de pesquisa interdisciplinar no Ensino Médio

Período de atividades no Laboratório Nacional de Computação Científica: 03 (três) de janeiro estendendo-se até 31 (trinta e um) de janeiro de 2022.

Número máximo de participantes: 5.

Resumo:

O Laboratório Nacional de Computação Científica possui forte destaque com a pós-graduação em Modelagem Computacional. O objetivo do programa é promover a interdisciplinaridade da pesquisa científica e tecnológica nas áreas de matemática, computação, métodos numéricos, controle, otimização, biologia computacional, medicina assistida por computação científica, química computacional e engenharias. Portanto, o projeto proposto para o Futuras Cientistas possui enfoque interdisciplinar, sendo composto por três subprojetos nas áreas de bioinformática, modelagem matemática e química computacional. Uma das principais inovações deste projeto é que as professoras e alunas poderão desenvolver atividades em três áreas distintas, com interseções, e igualmente importantes, beneficiando-se do caráter interdisciplinar para adquirir conhecimentos em diversas áreas.

A seguir vamos explicar sucintamente o plano de trabalho dos três subprojetos que formam o nosso projeto principal.

1. **Bioinformática (BI):** A Bioinformática é uma disciplina bastante ampla que abrange desde os métodos clássicos utilizados para comparação de sequências lineares ou estruturas tridimensionais até a modelagem e

análise de imagens. Ela visa a análise de dados moleculares biológicos complexos e heterogêneos em experimentos em larga escala, assim como o armazenamento, a organização, a visualização e a gerência da informação. O alvo principal da Bioinformática é buscar informações científicas relevantes a partir de um conjunto de dados biológicos e integrá-las em aplicações na área da saúde humana, animal e vegetal, na biotecnologia e na conservação do meio ambiente. A bioinformática usa códigos computacionais para várias aplicações com a finalidade de encontrar genes e proteínas, suas funções, desenvolver relações evolutivas e analisar as formas tridimensionais das proteínas. Dessa forma, será proposto nesse subprojeto uma introdução à análise de sequências biológicas utilizando algumas ferramentas e bancos de dados de bioinformática, disponíveis gratuitamente, para realizar o alinhamento de sequências, estudos de filogenia e biologia computacional evolutiva. O Plano de Trabalho inicia-se com uma introdução à biologia molecular onde serão apresentados a estrutura e função da célula, dos ácidos nucleicos e proteínas e o dogma central da biologia molecular. Será mostrado como o DNA (ácido desoxirribonucleico) é extraído da célula e como obter a sequência de nucleotídeos de forma ordenada através de técnicas de sequenciamento. Posteriormente, serão apresentados alguns bancos de dados (GenBank, UniProt) onde serão feitas buscas das sequências de interesse para identificação do gene de interesse e sua função. Serão apresentadas ferramentas para comparação de sequências (Blast), alinhamento múltiplos de sequências (mafft) e análises filogenéticas (MEGA). Serão apresentados o potencial uso dessas ferramentas em ambientes de computação de alto desempenho e portais científicos (Bioinfo-Portal). No final, uma palestra sobre computação de alto desempenho e uma visita guiada ao supercomputador Santos Dumont serão realizadas.

2. **Modelagem Matemática (MM):** A modelagem matemática consiste no processo de transformação de problemas do nosso cotidiano em

problemas matemáticos, na tentativa de encontrar soluções e promover melhor entendimento de fenômenos de interesse. Especificamente, a modelagem matemática estuda a simulação de sistemas reais a fim de prever seus comportamentos, sendo empregada em diversas áreas do conhecimento. Softwares matemáticos auxiliam tanto alunas quanto professoras no processo de aprendizagem. Mídias informáticas associadas à pedagogias que estejam em ressonância com novas tecnologias podem transformar o tipo de matemática abordada em sala de aula. O software matemático GeoGebra apresenta diversas ferramentas interativas e pode ser usado como instrumento auxiliar em diversas áreas da matemática, possibilitando trabalhar diversos conceitos como, por exemplo, o de funções. O presente subprojeto tem como objetivo trabalhar Modelagem Matemática utilizando o software GeoGebra de modo que alunas e professoras consigam realizar o processo de obtenção e verificação de modelos descritos por funções matemáticas. O conceito de função é um dos mais importantes da matemática, tendo destaque em diversas áreas do conhecimento, como física, biologia, ciências sociais, química e engenharias, dentre outras. O Plano de Trabalho inicia-se com a apresentação de um material introdutório sobre o software GeoGebra, explicando as principais funcionalidades do software. Serão desenvolvidas atividades sobre as seguintes funções: função de primeiro grau (função afim), função de segundo grau (função quadrática) e função exponencial. Após o estudo das funções, será proposta uma aplicação utilizando os conceitos estudados. A aplicação proposta consiste na modelagem do crescimento populacional de Petrópolis utilizando os dados do IBGE (pesquisa como Censo demográfico) e a teoria de crescimento populacional de Malthus.

3. **Química Computacional (QC):** A Química Computacional é um ramo interdisciplinar da Química que emprega ferramentas computacionais para calcular propriedades e simular o comportamento de diferentes moléculas. Por envolver as mais diversas especialidades, como química, física, matemática e informática, as metodologias e programas usados

na química computacional colaboram com o processo de ensino-aprendizagem ao proporcionar maneiras mais intuitivas de entender diversos conceitos da química, como por exemplo permitir que os usuários observem moléculas no espaço tridimensional utilizando o computador. Diversos programas de Química Computacional estão disponíveis de forma gratuita, podendo ser utilizados em sala de aula para facilitar a compreensão de trabalhos realizados pela comunidade científica em pesquisas de várias áreas, como Química Medicinal e Nanotecnologia. Dentre esses programas, utilizaremos neste projeto Marvin (ChemAxon) e Maestro (Schrödinger). Nesse projeto estão previstas as seguintes atividades: (1) desenho e visualização bidimensional de pequenas moléculas, (2) desenho de reações químicas no espaço 2D; (3) desenho de pequenas moléculas no espaço 3D; (4) estudo de geometria molecular (comprimento de ligação, ângulos etc), isomeria e interações atômicas; (5) introdução a banco de pequenas moléculas (DrugBank e PubChem); e (6) visualização de macromoléculas no espaço 3D.

CRONOGRAMA DE ATIVIDADES	
SEMANA 1 - Atividades on-line	
03/01	Abertura
04/01	Atividade de boas-vindas
05/01	Atividade de Boas-vindas
06/01	Palestras Futuras Cientistas
SEMANA 2 - Atividades híbridas	
09/01	Atividade MM - Inicialização ao software GeoGebra e atividades relacionadas a funções afim (teoria e aplicação).

	Atividade QC - Desenho e visualização bidimensional de pequenas moléculas.
10/01	Atividade MM- Atividades relacionadas a funções de segundo grau (teoria e aplicação). Atividade QC - Desenho de reações químicas no espaço 2D; desenho de pequenas moléculas no espaço 3D.
11/01	Atividade MM - Atividades relacionadas a funções exponenciais (teoria e aplicação). Atividade QC - Estudo de geometria molecular (comprimento de ligação, ângulos etc), isomeria e interações atômicas.
12/01	Atividade MM - Explicação da aplicação de modelagem matemática no software GeoGebra e coleta dos dados. Atividade QC - Introdução a banco de pequenas moléculas (DrugBank e PubChem).
13/01	Atividade MM - Desenvolvimento da Aplicação. Atividade QC - Visualização de macromoléculas no espaço 3D. Palestras Futuras Cientistas
SEMANA 3 - Atividades híbridas	
16/01	Atividade BI - Introdução à Biologia Molecular - teoria Atividade - Palestra e discussão sobre Supercomputação e visita ao supercomputador Santos Dumont (Carla Osthoff)
17/01	Atividade BI - Introdução à Biologia Molecular - prática; - Introdução à Bioinformática - bancos de dados biológicos: teoria e prática

18/01	Atividade BI - Introdução à Bioinformática - Alinhamento de sequências gênicas, filogenia e uso do Portal de Bioinformática
19/01	Atividade - Palestra e discussão sobre Inteligência Artificial (Mariza Ferro) Atividade - Palestra e discussão sobre Modelagem Computacional (Sandra Malta e Regina Almeida)
20/01	Palestras Futuras Cientistas
SEMANA 4	
23/01	Preparação do Relatório Final
24/01	Preparação do Relatório Final
25/01	Preparação do Relatório Final
26/01	Preparação do Relatório Final
27/01	Palestras
SEMANA 5: Semana de Encerramento	
30/01	Entrega e Apresentação do Relatório Final
31/01	Cerimônia de Encerramento

Equipe do Plano de Trabalho

Nome Completo	E-mail	Endereço	Instituição de Vínculo	Função	Carga Horária
Carla Osthoff Barros	osthoff@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	4h
Kary Ocaña	karyann@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Luciane Prioli Ciapina	luciane@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Regina Celia Cerqueira de Almeida	rcca@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Sandra Mara Cardoso Malta	smcm@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Mariza Ferro	mariza.ferro@gmail.com .lncc	Av. Gal. Milton Tavares de Souza, s/nº Campus da Praia Vermelha - Boa Viagem - Niterói / RJ CEP: 24210-346	UFF	Palestrante	4h
Isabella Alvim Guedes	isabella@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Jaqueline da Silva Angelo	jsangelo@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Karina Baptista dos Santos	karinabs@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Anmily Paula Martins	anmily@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora (representante)	80h

Ana Luiza Martins Karl	almkarl@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h
Andressa Alves Machado da Silva	andressa@lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Pesquisadora - Tutora	80h

Diovana Mussolin	diovanam@posgrad.lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Monitora	40h
Tayna Lobo da Silva	tlobo@posgrad.lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Monitora	40h
Mariana Dória Prata Lima	mdoria@posgrad.lncc.br	Av. Getúlio Vargas, 333 - Quitandinha, Petrópolis - RJ, 25651-076	LNCC	Monitora	40h