

São Paulo, 6 de janeiro de 2016

» 18/01/2016 - **Ciclo de palestras na FFCLRP traz novidades em Psicobiologia**

Procurar...

Busca

Editorias

[Ciências](#)[Cultura](#)[Educação](#)[Especiais](#)[Esporte e Lazer](#)[Institucional](#)[Meio ambiente](#)[Saúde](#)[Sociedade](#)[Tecnologia](#)[Vídeos](#)

Publicações

- [Hiroshima e Nagasaki](#)
- [Mudanças climáticas](#)
- [O Fio Invisível da Felicidade](#)

Quadro de Avisos

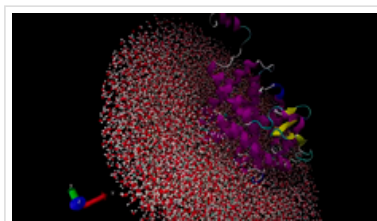
- [Pós-doutorado em Matemática](#)
- [Síndrome de Down](#)
- [Novo blog da BBM](#)

Software traz novidades nas simulações de dinâmica molecular

Por [Da Redação](#) - agenusp@usp.brPublicado em 10/dezembro/2015 | Editoria : [Tecnologia](#) | [Imprimir](#) | [Recommend](#) {625}

Leonardo Zacarin, da Assessoria Cepid CeMEAI

Um programa de computador desenvolvido por pesquisadores do Centro de Ciências Matemáticas Aplicadas à Indústria (CeMEAI), sediado no Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC) da USP, em São Carlos, e do Centro de Pesquisa em Engenharia e Ciências Computacionais (CCES) — Centro de Pesquisa, Inovação e Difusão (Cepid) sediado na Universidade Estadual de Campinas (Unicamp) — criou novas perspectivas para a área das simulações de dinâmica molecular. O Packmol facilita a vida de quem precisa simular o comportamento de moléculas em ambientes complexos.



Simulações permitem entender como as moléculas funcionam, com resolução atômica

“As simulações servem para entender como as moléculas funcionam, com resolução atômica. É como se déssemos um zoom em qualquer objeto: vemos todas essas moléculas, átomo por átomo, e entendemos quais são suas propriedades”, conta o professor Leandro Martínez, do Instituto de Química da Unicamp.

Leandro Martínez desenvolveu o Packmol ao lado de seu pai, José Mario Martínez, que é professor do Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica (IMECC), também da Unicamp, e de Ernesto Birgin, do Instituto de Matemática e Estatística (IME) da USP em São Paulo. José Martínez e Birgin, que são pesquisadores do CeMEAI, foram responsáveis pelos métodos matemáticos do programa desenvolvido no ano de 2005, cuja grande inovação é a facilidade de dispor as moléculas para dar início a simulações de sistemas complicados.

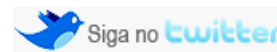
“Estamos acostumados a ouvir que é possível prever a trajetória de planetas ao longo do tempo se soubermos a posição inicial dos planetas e como eles interagem entre si. O que a gente faz numa simulação de dinâmica molecular é exatamente a mesma coisa. Precisamos saber as posições iniciais das moléculas e como elas se comportam, e o Packmol cria a posição espacial de todos os átomos no espaço”, esclarece Leandro Martínez.

“Basicamente, para isso, resolvemos problemas de empacotamento. Antes do Packmol, o início das simulações de dinâmica molecular era feito manualmente. O pesquisador ficava na frente do computador colocando as moléculas e tentando satisfazer uma série de restrições. O Packmol automatizou essa tarefa”, resume Birgin.

Para desenvolver os modelos matemáticos, Leandro Martínez, José Martínez e Birgin encararam o problema físico-químico, que envolve as moléculas, como um problema de empacotamento. Empacotar é um problema de otimização, a área de especialidade de José Martínez e Birgin na matemática.

“Você empacota quando faz as malas para uma viagem, porque você coloca objetos dentro da mala de uma maneira que eles caibam. Se você empacota mal, os objetos não cabem”, explica José Martínez.

O programa é resultado da integração entre as áreas da matemática, representada por José Martínez e Birgin, e da físico-química, na qual trabalha Leandro Martínez, que também é pesquisador do CCES, da Unicamp. “Essas colaborações que a gente tem com a matemática são importantes, porque



Leia no [facebook](#)

Newsletters

Inscriva-se para receber nossa newsletter

Nome:

Sobrenome:

Empresa:

Email:

Vídeos

- [Simulação de cirurgias em maxilar tem novo protocolo](#)



Professor cria planejamento virtual 3D para cirurgias de correções de deformidades dento-faciais

correlacionam o nosso trabalho, que é de bioquímica computacional, com a parte de otimização, de matemática, que está relacionada ao CeMEAI”, relata Leandro Martinez.

O Packmol é distribuído na forma de software livre e, nos dez anos de existência, já foi baixado cerca de 14 mil vezes por pesquisadores de mais de 100 países. O download é grátis e pode ser feito no site do programa.

Sobre o CeMEAI

O CeMEAI, com sede no ICMC, em São Carlos, é um dos Centros de Pesquisa, Inovação e Difusão (CEPIDs) financiados pela FAPESP. O Centro é especialmente adaptado e estruturado para promover o uso de ciências matemáticas (em particular matemática aplicada, estatística e ciência da computação) como um recurso industrial.

As atividades do Centro são realizadas dentro de um ambiente interdisciplinar, enfatizando-se a transferência de tecnologia e a educação e difusão do conhecimento para as aplicações industriais e governamentais. As atividades são desenvolvidas nas áreas de Otimização Aplicada e Pesquisa Operacional, Mecânica de Fluidos Computacional, Modelagem de Risco, Inteligência Computacional e Engenharia de Software.

Além do ICMC, o CEPID–CeMEAI conta com outras seis instituições associadas: o Centro de Ciências Exatas e Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos (CCET–UFSCar); o Instituto de Matemática Estatística e Computação Científica da Universidade Estadual de Campinas (IMECC–UNICAMP); o Instituto de Biociências Letras e Ciências Exatas da Universidade Estadual Paulista (IBILCE–UNESP); a Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade Estadual Paulista (FCT–UNESP); o Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE); e o Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo (IME–USP).

Foto: Reprodução / Vídeo CeMEAI

Mais informações: (16) 3373.6609; e-mail contatocemeai@icmc.usp.br

Mais informações

Palavras chave

[CeMEAI](#), [Fapesp](#), [ICMC](#), [IME](#), [modelos matemáticos](#), [moléculas](#), [Packmol](#), [Unicamp](#)

Artigos relacionados

- [Software otimiza trabalho em fundição de pequeno porte](#)
- [Projeto mapeia caminhar de idosos para prevenir quedas](#)
- [Encontro CeMEAI](#)

Compartilhe

Recommend 625 people recommend this. Be the first of your friends.

- [Compartilhe no Delicious](#)
- [Compartilhe no Digg](#)
- [Compartilhe no Facebook](#)
- [Compartilhe no LinkedIn](#)
- [Compartilhe no Orkut](#)
- [Compartilhe no Stumblers](#)
- [Compartilhe no Technorati](#)
- [Compartilhe no Tweet](#)

Agência USP de Notícias

| [Base de Especialistas](#) | [Créditos](#) | [Direitos autorais](#) | [Newsletter](#) | [Sobre a Agência](#)

Rua da Reitoria, 109 bloco L - 5º andar

CEP 05508-900 - São Paulo - Brasil

+55 11 3091-4411 - E-mail: agenusp@usp.br

Canais - [Artigos RSS de todo o site](#)

| [Cursos e palestras](#) | [Editorias](#) | [Publicações](#) | [Quadro de avisos](#)

Editorias

| [Ciências](#) | [Cultura](#) | [Educação](#) | [Especiais](#) | [Esporte e Lazer](#)

| [Institucional](#) | [Meio ambiente](#) | [Saúde](#) | [Sociedade](#) | [Tecnologia](#)

| [Vídeos](#) |

© 2000-2016 Universidade de São Paulo



Universidade de São Paulo

[Fale com a USP](#)
[Créditos](#)

[USP.br](#)
[USP hoje](#)
[Ensino](#)
[Pesquisa](#)
[Extensão](#)
[Institucional](#)

Mídias da USP
[Agência USP de Notícias](#)
[EDUSP](#)
[IPTV](#)
[Jornal da USP](#)
[Rádio USP](#)
[Revista Espaço Aberto](#)
[Revista USP](#)
[TV USP](#)

Links úteis
[Reitoria](#)
[Pró-reitorias](#)
[Institutos, Faculdades e](#)
[Escolas](#)
[Graduação](#)
[Pós-graduação](#)
[Webmail](#)
[Lista telefônica](#)
[Serviços de A a Z](#)

Procurar...

[usp.br](#)

[pessoas](#)

