

Pesquisa em Física Computacional no IFSC–USP

Grupos de pesquisa envolvidos em pesquisas de Física Computacional (ver site do IFSC–USP):

- Biotecnologia Molecular
- Computação Interdisciplinar
- Física Computacional e Instrumentação Aplicada
- Física Teórica – FFI

Nas páginas seguintes estão anexados os resumos de algumas das atividades de pesquisa em Física Computacional nesses grupos:

Simulações de Dinâmica Molecular de Biomoléculas

Prof. Dr. Leandro Martínez (Biotecnologia Molecular)

A manutenção da vida depende de mecanismos moleculares complexos que mantêm estruturas funcionais e processos bioquímicos persistentes. Apesar dos movimentos moleculares serem em última instância difusivos e caóticos, as restrições impostas pelas estruturas permitem, com custo energético significativo, a própria manutenção destas estruturas e da sequência de eventos que caracterizam um ser vivo. O conhecimento experimental das estruturas de biomoléculas e das leis de movimento mais simples tem que permitir, assim, a dedução de mecanismos biofísicos. No Laboratório de Dinâmica Molecular do Grupo de Biotecnologia Estrutural, simulam-se a dinâmica molecular de proteínas e outras biomoléculas a partir de modelos estruturais experimentais, e de modelos das interações entre átomos. Os modelos das interações têm que ser suficientemente precisos para uma descrição adequada das forças intermoleculares, e suficientemente simples para permitir a integração de equações de movimento por longos períodos. Simulações de biomoléculas em solução consistem na resolução iterativa, numérica, de equações de movimento geralmente clássicas, de centenas de milhares de átomos, para as quais é necessário empregar computação de alto desempenho, o que inclui paralelismo em grande escala e novas tecnologias, como computação em unidades de processamento gráfico. Uma vez obtidas trajetórias dos sistemas dinâmicos suficientemente longas para amostrar movimentos relevantes em escala biológica, espera-se a compreensão dos mecanismos em um nível superior àquele acessível pela análise das estruturas experimentais estáticas.

Sistemas Distribuídos Complexos

Prof. Dr. Gonzalo Travieso (Computação Interdisciplinar)

Com o advento dos computadores pessoais na década de 1980, houve um aumento vertiginoso na quantidade de computadores em uso. A conexão desses diversos computadores pela Internet não só permite a comunicação entre seus usuários, mas também possibilita que diversos computadores sejam utilizados de forma coordenada para a execução de alguma tarefa. Sistemas de computação em que há colaboração entre diversos computadores possivelmente geograficamente dispersos e pertencentes a diferentes pessoas são denominados “sistemas distribuídos”.

Como não existe uma administração central desses sistemas, a sua organização é determinada pela forma como eles cresceram e portanto eles acabam tendo algumas ca-

racterísticas similares a outros sistemas naturais complexos. Em nosso grupo, estudamos essas características, e de que forma elas afetam o desempenho dos sistemas distribuídos.

Visão Cibernética

Prof. Dr. Luciano da Fontoura Costa (Computação Interdisciplinar)

O subgrupo Visão Cibernética ocupa-se das seguintes principais áreas: (i) análise de imagens; (ii) redes complexas; (iii) reconhecimento de padrões; (iv) ciência e humanidades/artes. Em particular, temos desenvolvido conceitos e métodos de análise de imagens e redes complexas, os quais temos utilizado para a representação, caracterização, modelagem e simulação de diversos problemas reais incluindo neurociências (relação entre forma, função e conectividade), internet e WWW (algoritmos para compreensão de acessos), biologia de sistemas (estudo da estrutura de mitocôndrias, ossos e vascularização), transportes, dentre muitas outras áreas.

Computação Científica

Prof. Dr. Odemir Martinez Bruno (Computação Interdisciplinar)

O grupo de Computação Científica (GCC), que é um subgrupo do grupo de Computação Interdisciplinar, tem como principal objetivo realizar pesquisas que integrem a Ciência da Computação, Física e Matemática no estudo de problemas teóricos e aplicados. Os principais interesses do grupo são: Visão Computacional, Análise de Imagens, Reconhecimento de Padrões, Inteligência Artificial e Ciências não Lineares. As principais ferramentas e métodos matemáticos investigados pelo GCC são: caos, fractais, análise multiescala, automata, e redes complexas. O grupo concentra as suas aplicações nas áreas de biodiversidade, biologia vegetal, análise de imagens em nanoescala e criptografia.

O GCC tem um site onde podem ser obtidas maiores informações, imagens, textos etc: <http://scg.ifsc.usp.br>

Física da Informação e da Complexidade

Prof. Dr. Leonardo Paulo Maia (Física Computacional e Instrumentação Aplicada)

Minhas atividades gerais de pesquisa consistem no estudo da transformação e transporte de informação em sistemas com organização complexa. Isso inclui o estudo, via simulações computacionais, do problema de codificação e decodificação neural, do processamento de informação em modelos de estruturas neurais ou até mesmo o estudo da organização espaço-temporal em populações genéricas regidas por dinâmicas evolucionárias complexas. Neste momento, minha principal linha de pesquisa consiste na aplicação de conceitos de criticalidade em sistemas da física estatística fora do equilíbrio ao estudo do processamento de informação em redes de unidades excitáveis.

Astrofísica de Partículas

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho (Física Computacional e Instrumentação Aplicada)

Simulação e análise de dados com recursos computacionais sofisticados para solução de equações, propagação de partículas, reconhecimento de padrões e descrição dos detectores. Partículas com energias macroscópicas são geradas em algum lugar desconhecido do Universo e atingem a Terra. Experimentos espalhados pelo mundo, tais como o Observatório Pierre Auger do qual somos membro, detectam essas partículas. Os dados desses Observatórios são copiados nos computadores do IFSC onde pesquisadores brasileiros podem rodar suas análises. Os fenômenos que ocorrem desde a emissão dessas partículas até a sua detecção nos Observatórios terrestres não são completamente entendidos e a compreensão destes fenômenos passa inevitavelmente pelo uso de ferramentas computacionais.

QCD na Rede

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes (Física Teórica – FFI)

A força forte, que liga quarks por meio de glúons para formar prótons e nêutrons, é descrita pela cromodinâmica quântica (QCD). Infelizmente, os métodos usuais de teorias

quânticas de campos falham para a QCD, mas a teoria pode ser estudada através de simulações numéricas com métodos de Monte Carlo, como feito pelo Grupo de Física de Partículas Computacional do IFSC (<http://lattice.ifsc.usp.br>). Nossos cálculos utilizam processamento paralelo de alto desempenho em vários clusters de PCs e em um cluster de GPUs. Os problemas estudados incluem o confinamento de quarks e a transição de fase da matéria usual para um plasma de quarks e glúons, que existiu no universo logo após o Big Bang.