



Engenharia Moderna: Soluções para Problemas da Sociedade e da Indústria

Filipe Alves Coelho
Iara Lúcia Tescarollo
Vicente Idalberto Becerra Sablon
(Organizadores)

Atena
Editora
Ano 2020



Engenharia Moderna: Soluções para Problemas da Sociedade e da Indústria

Filipe Alves Coelho
Iara Lúcia Tescarollo
Vicente Idalberto Becerra Sablon
(Organizadores)

Atena
Editora
Ano 2020

Editora Chefe

Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Assistentes Editoriais

Natalia Oliveira

Bruno Oliveira

Flávia Roberta Barão

Bibliotecário

Maurício Amormino Júnior

Projeto Gráfico e Diagramação

Natália Sandrini de Azevedo

Camila Alves de Cremo

Karine de Lima Wisniewski

Luiza Alves Batista

Maria Alice Pinheiro

Imagens da Capa

Shutterstock

Edição de Arte

Luiza Alves Batista

Revisão

Os Autores

2020 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2020 Os autores

Copyright da Edição © 2020 Atena Editora

Direitos para esta edição cedidos à Atena Editora pelos autores.



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição-Não-Comercial-NãoDerivativos 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores, inclusive não representam necessariamente a posição oficial da Atena Editora. Permitido o *download* da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

A Atena Editora não se responsabiliza por eventuais mudanças ocorridas nos endereços convencionais ou eletrônicos citados nesta obra.

Todos os manuscritos foram previamente submetidos à avaliação cega pelos pares, membros do Conselho Editorial desta Editora, tendo sido aprovados para a publicação.

Conselho Editorial

Ciências Humanas e Sociais Aplicadas

Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas

Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná

Prof. Dr. Américo Junior Nunes da Silva – Universidade do Estado da Bahia

Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná

Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais

Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília

Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa
Prof. Dr. Daniel Richard Sant’Ana – Universidade de Brasília
Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia
Profª Drª Dilma Antunes Silva – Universidade Federal de São Paulo
Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá
Prof. Dr. Elson Ferreira Costa – Universidade do Estado do Pará
Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima
Prof. Dr. Gustavo Henrique Cepolini Ferreira – Universidade Estadual de Montes Claros
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionele delle Figlie de Maria Ausiliatrice
Prof. Dr. Jadson Correia de Oliveira – Universidade Católica do Salvador
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins
Prof. Dr. Luis Ricardo Fernandes da Costa – Universidade Estadual de Montes Claros
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Pontifícia Universidade Católica de Campinas
Profª Drª Maria Luzia da Silva Santana – Universidade Federal de Mato Grosso do Sul
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

Ciências Agrárias e Multidisciplinar

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano
Profª Drª Carla Cristina Bauermann Brasil – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Prof. Dr. Cleberton Correia Santos – Universidade Federal da Grande Dourados
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná
Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Prof. Dr. Jael Soares Batista – Universidade Federal Rural do Semi-Árido
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

Ciências Biológicas e da Saúde

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Débora Luana Ribeiro Pessoa – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Douglas Siqueira de Almeida Chaves -Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina
Profª Drª Eysler Gonçalves Maia Brasil – Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria
Prof. Dr. Helio Franklin Rodrigues de Almeida – Universidade Federal de Rondônia
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Jefferson Thiago Souza – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Jesus Rodrigues Lemos – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Jônatas de França Barros – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Prof. Dr. Luís Paulo Souza e Souza – Universidade Federal do Amazonas
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. Marcus Fernando da Silva Praxedes – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Profª Drª Maria Tatiane Gonçalves Sá – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá
Prof. Dr. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados
Profª Drª Regiane Luz Carvalho – Centro Universitário das Faculdades Associadas de Ensino
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto
Prof. Dr. Alexandre Leite dos Santos Silva – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná
Prof. Dr. Douglas Gonçalves da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Profª Drª Érica de Melo Azevedo – Instituto Federal do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Profª Dra. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande

Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Profª Drª Priscila Tessmer Scaglioni – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

Linguística, Letras e Artes

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins
Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro
Profª Drª Carolina Fernandes da Silva Mandaji – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará
Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Paraná
Profª Drª Miranilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará
Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste
Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia

Conselho Técnico Científico

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza
Prof. Me. Adalto Moreira Braz – Universidade Federal de Goiás
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba
Prof. Dr. Adilson Tadeu Basquerote Silva – Universidade para o Desenvolvimento do Alto Vale do Itajaí
Prof. Me. Alexsandro Teixeira Ribeiro – Centro Universitário Internacional
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão
Profª Ma. Andréa Cristina Marques de Araújo – Universidade Fernando Pessoa
Profª Drª Andreza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico
Profª Drª Andrezza Miguel da Silva – Faculdade da Amazônia
Profª Ma. Anelisa Mota Gregoleti – Universidade Estadual de Maringá
Profª Ma. Anne Karynne da Silva Barbosa – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais
Prof. Me. Armando Dias Duarte – Universidade Federal de Pernambuco
Profª Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar
Profª Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos
Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Ma. Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo
Profª Drª Cláudia Taís Siqueira Cagliari – Centro Universitário Dinâmica das Cataratas
Prof. Me. Clécio Danilo Dias da Silva – Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará
Profª Ma. Daniela da Silva Rodrigues – Universidade de Brasília

Profª Ma. Daniela Remião de Macedo – Universidade de Lisboa
Profª Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco
Prof. Me. Douglas Santos Mezacas – Universidade Estadual de Goiás
Prof. Me. Edevaldo de Castro Monteiro – Embrapa Agrobiologia
Prof. Me. Eduardo Gomes de Oliveira – Faculdades Unificadas Doctum de Cataguases
Prof. Me. Eduardo Henrique Ferreira – Faculdade Pitágoras de Londrina
Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil
Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita
Prof. Me. Ernane Rosa Martins – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás
Prof. Me. Euvaldo de Sousa Costa Junior – Prefeitura Municipal de São João do Piauí
Profª Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora
Prof. Dr. Fabiano Lemos Pereira – Prefeitura Municipal de Macaé
Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas
Profª Drª Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo
Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária
Prof. Me. Givanildo de Oliveira Santos – Secretaria da Educação de Goiás
Prof. Dr. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná
Prof. Me. Gustavo Krahl – Universidade do Oeste de Santa Catarina
Prof. Me. Helton Rangel Coutinho Junior – Tribunal de Justiça do Estado do Rio de Janeiro
Profª Ma. Isabelle Cerqueira Sousa – Universidade de Fortaleza
Profª Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia
Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College
Prof. Me. Jhonatan da Silva Lima – Universidade Federal do Pará
Prof. Dr. José Carlos da Silva Mendes – Instituto de Psicologia Cognitiva, Desenvolvimento Humano e Social
Prof. Me. Jose Elyton Batista dos Santos – Universidade Federal de Sergipe
Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay
Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco
Profª Drª Juliana Santana de Curcio – Universidade Federal de Goiás
Profª Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Kamilly Souza do Vale – Núcleo de Pesquisas Fenomenológicas/UFGA
Prof. Dr. Kárpio Márcio de Siqueira – Universidade do Estado da Bahia
Profª Drª Karina de Araújo Dias – Prefeitura Municipal de Florianópolis
Prof. Dr. Lázaro Castro Silva Nascimento – Laboratório de Fenomenologia & Subjetividade/UFPR
Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Ma. Lillian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará
Profª Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ
Profª Drª Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás
Prof. Dr. Lucio Marques Vieira Souza – Secretaria de Estado da Educação, do Esporte e da Cultura de Sergipe
Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados
Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual do Paraná
Prof. Dr. Michel da Costa – Universidade Metropolitana de Santos
Prof. Dr. Marcelo Máximo Purificação – Fundação Integrada Municipal de Ensino Superior

Prof. Me. Marcos Aurelio Alves e Silva – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Profª Ma. Maria Elanny Damasceno Silva – Universidade Federal do Ceará

Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri

Prof. Me. Ricardo Sérgio da Silva – Universidade Federal de Pernambuco

Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal

Prof. Me. Robson Lucas Soares da Silva – Universidade Federal da Paraíba

Prof. Me. Sebastião André Barbosa Junior – Universidade Federal Rural de Pernambuco

Profª Ma. Silene Ribeiro Miranda Barbosa – Consultoria Brasileira de Ensino, Pesquisa e Extensão

Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo

Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana

Profª Ma. Thatianny Jasmine Castro Martins de Carvalho – Universidade Federal do Piauí

Prof. Me. Tiago Silvio Dedoné – Colégio ECEL Positivo

Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

Engenharia moderna: soluções para problemas da sociedade e da indústria

Editora Chefe: Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira
Bibliotecário Maurício Amormino Júnior
Diagramação: Camila Alves de Cremo
Correção Mariane Aparecida Freitas
Edição de Arte: Luiza Alves Batista
Revisão: Os Autores
Organizadores: Filipe Alves Coelho
Iara Lúcia Tescarollo
Vicente Idalberto Becerra Sablon

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP) (eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)

E57 Engenharia moderna [recurso eletrônico] : soluções para problemas da sociedade e da indústria / Organizadores Filipe Alves Coelho, Iara Lúcia Tescarollo, Vicente Idalberto Becerra Sablon. – Ponta Grossa, PR: Atena, 2020.

Formato: PDF
Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader
Modo de acesso: World Wide Web
Inclui bibliografia
ISBN 978-65-5706-446-7
DOI 10.22533/at.ed.467202809

1. Engenharia – Pesquisa – Brasil. I. Coelho, Filipe Alves. II. Tescarollo, Iara Lúcia. III. Sablon, Vicente Idalberto Becerra.

CDD 620

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná – Brasil
Telefone: +55 (42) 3323-5493
www.atenaeditora.com.br
contato@atenaeditora.com.br

APRESENTAÇÃO

Enquanto esta obra era produzida, a humanidade via-se diante de uma de suas maiores crises recentes: a pandemia do novo coronavírus. Este cenário escancarou a importância da ciência como ferramenta e um dos pilares da evolução da sociedade. Ao lado da ciência, a engenharia implementa o conhecimento desenvolvido na forma de produtos e serviços, tornando real e sustentável o conhecimento científico.

Sem dúvida, o que tornou possível verdadeiras revoluções na ciência e na engenharia foram os conhecimentos desenvolvidos na interface entre distintas áreas do conhecimento. As ciências biológicas e a engenharia ambiental produziram equipamentos para tratamento de efluentes empregando microrganismos. A computação e a engenharia de processos permitem que um funcionário monitore e controle uma fábrica mesmo estando a quilômetros de distância. A medicina, física e engenharia elétrica produzem equipamentos que enxergam o interior do corpo humano em alta resolução.

Neste sentido, esta obra é uma coletânea de trabalhos de professores cientistas e engenheiros, com vasto conhecimento em suas áreas de atuação, que destaca como a ciência e a tecnologia são empregadas para resolver problemas da sociedade. Em comum, além dos esforços para tornar a sociedade e a indústria mais sustentáveis, está o fato de todos os trabalhos terem sido desenvolvidos na cidade de Campinas ou em cidades próximas.

A multidisciplinaridade presente nesta obra é reflexo de um trabalho em construção no sentido de agregar o conhecimento acumulado e condensá-lo em produtos e serviços ou mesmo um fim em si, visando informar a sociedade de que temos pesquisa de boa qualidade sendo feita no Brasil.

Com o compromisso de incentivar a pesquisa acadêmica, divulgar e disseminar o conhecimento, a Editora Atena, através dessa obra, traz um rico material pelo qual será possível atender aos anseios daqueles que buscam ampliar seus estudos nas temáticas aqui abordadas. Boa leitura!

Dilnei Giseli Lorenzi
Pró-Reitor de Ensino Pesquisa e Extensão
Universidade São Francisco
Filipe Alves Coelho
Iara Lúcia Tescarollo
Vicente Idalberto Becerra Sablón
Organizadores

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1..... 1

GENERAL ASPECTS OF TELEMEDICINE: FROM EMERGENCE TO USE IN THE COVID PANDEMIC 19

Ana Carolina Borges Monteiro

Reinaldo Padilha França

Giulliano Paes Carnielli

Yuzo Iano

Rangel Arthur

DOI 10.22533/at.ed.4672028091

CAPÍTULO 2..... 14

DISAGGREGATION OF LOADS IN THE SMART GRID CONTEXT

Jézer Oliveira Pedrosa

Júlio Cesar Pereira

Ana Carolina Borges Monteiro

Reinaldo Padilha França

Yuzo Iano

Rangel Arthur

DOI 10.22533/at.ed.4672028092

CAPÍTULO 3..... 26

COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO EDINÂMICA MOLECULAR

Fábio Andrijauskas

Glaucilene Ferreira Catroli

DOI 10.22533/at.ed.4672028093

CAPÍTULO 4..... 39

DISPOSITIVO PARA AUXÍLIO À PESSOAS COM DEFICIÊNCIA AUDITIVA

Vicente Idalberto Becerra Sablon

Bruno Penteado Evangelista

Annete Silva Faesarella

DOI 10.22533/at.ed.4672028094

CAPÍTULO 5..... 53

FATURAMENTO PRÉ-PAGO DE ENERGIA ELÉTRICA: PANORAMA DA MODALIDADE E ANÁLISE DA EXPERIÊNCIA BRASILEIRA

Annete Silva Faesarella

Amanda de Oliveira Ferri

Ednan Ferreira da Silva

Vicente Idalberto Becerra Sablon

DOI 10.22533/at.ed.4672028095

CAPÍTULO 6..... 66

EXPRESSÕES ANALÍTICAS DO CAMPO ELETROMAGNÉTICO NO DOMÍNIO DO TEMPO PROVOCADO POR TRANSITÓRIOS DE CORRENTE ELÉTRICA

Geraldo Peres Caixeta

DOI 10.22533/at.ed.4672028096

CAPÍTULO 7..... 83

DESEMPENHO DE MICRORREACTORES FABRICADOS POR MANUFATURA ADITIVA EM REAÇÃO DE SAPONIFICAÇÃO DO ACETATO DE ETILA

Katherine Oliveira Alves

Vanessa de Souza Rocha

Filipe Alves Coelho

DOI 10.22533/at.ed.4672028097

CAPÍTULO 8..... 95

AVALIAÇÃO DA BIODEGRADAÇÃO E ENVELHECIMENTO ACELERADO POR RADIAÇÃO ULTRAVIOLETA NA BLENDAS PBAT/TPS

Fernanda Andrade Tigre da Costa

Marcelo Augusto Gonçalves Bardi

DOI 10.22533/at.ed.4672028098

CAPÍTULO 9..... 116

ESTUDO DA EFICIÊNCIA DA REMOÇÃO DA PRATA SOLÚVEL EM EFLUENTES UTILIZANDO FIBRA DE COCO IN NATURA E ATIVADA

Jaqueline Cristina de Souza

Núbia de Moura Dias Sousa

Pollyanna Oliveira Coutinho

Danielle Matias Rodrigues

Rafael Augusto Valentim da Cruz Magdalena

André Augusto Gutierrez Fernandes Beati

DOI 10.22533/at.ed.4672028099

CAPÍTULO 10..... 137

AVALIAÇÃO DE SISTEMAS EMULSIONADOS FORMULADOS COM ÓLEO DE BURITI

Jeane Caroline Oliveira

Ludmila de Oliveira Maia

Iara Lúcia Tescarollo

DOI 10.22533/at.ed.46720280910

CAPÍTULO 11..... 152

EMBALAGEM CARTONADA: METODOLOGIA PARA SEPARAÇÃO E RECICLAGEM DE SEUS COMPONENTES

Mayara Elizabeth Pereira

José Fernando Marin Junior

Roberta Martins da Costa Bianchi

DOI 10.22533/at.ed.46720280911

CAPÍTULO 12.....	168
DESAFIOS DA DRENAGEM URBANA NO ESTADO DE SÃO PAULO	
Ana Caroline Ross Mateo	
Angélica Sampaio dos Santos	
Renata Lima Moretto	
DOI 10.22533/at.ed.46720280912	
CAPÍTULO 13.....	180
DESENVOLVIMENTO DE SISTEMA DE FILTRAÇÃO PARA MELHORIA DA QUALIDADE DA ÁGUA DE RIBEIRINHOS	
Gabriela Consoline Pires	
Liliani Alves da Silva	
Monica Tais Siqueira D'Amelio Felipe	
DOI 10.22533/at.ed.46720280913	
SOBRE OS ORGANIZADORES.....	192
ÍNDICE REMISSIVO.....	194

CAPÍTULO 3

COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO E DINÂMICA MOLECULAR

Data de aceite: 26/08/2020

Fábio Andrijauskas

Universidade São Francisco
Itatiba - SP

<http://lattes.cnpq.br/7771878233635494>

Glaucilene Ferreira Catroli

UNICAMP
Campinas - SP

<http://lattes.cnpq.br/4914553972592247>

RESUMO: A ciência é um motor essencial para os avanços de toda a humanidade e a utilização dessa poderosa ferramenta é possível criar diversos modelos. Um desses modelos é a simulação computacional que permite prever, entender e fazer a ciência avançar de diversas formas. Um dos tipos de simulação computacional é a dinâmica molecular, pela qual é possível compreender o comportamento de átomos e moléculas nos mais diversos cenários. Esse entendimento atomístico ajuda na produção de novos materiais, fármacos, vacinas e diferentes outros alvos. Para que seja possível utilizar a dinâmica molecular, é necessário grande poder computacional, nesse momento e que a dinâmica molecular precisa da computação de alto desempenho. A união da dinâmica molecular com a computação de alto desempenho é uma poderosa ferramenta rumo à novas e promissoras descobertas.

PALAVRAS-CHAVE: Dinâmica molecular, computação de alto desempenho, fármacos.

HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND MOLECULAR DYNAMICS

ABSTRACT: Science is an essential engine for the advances of all humanity and the use of this powerful tool is possible to create several models. One of these models is computer simulation that allows to predict, understand, and advance science in different ways. One of the types of computer simulation is molecular dynamics, by which it is possible to understand the behavior of atoms and molecules in the most diverse scenarios. This atomistic understanding helps in the production of new materials, drugs, vaccines, and different other targets. To be able to use molecular dynamics, a larger computational power is needed, at that moment when molecular dynamics needs the high performance computing. The union of molecular dynamics with high performance computing is a powerful tool towards new and promising discoveries.

KEYWORDS: Molecular dynamics, high-performance computing, drugs.

1 | INTRODUÇÃO

Durrant *et al.* (2011) apresentam a citação do vencedor do Prêmio Nobel *Richard Feynman*:

"se nomearmos a suposição mais poderosa de todas, o que nos leva a tentar entender a vida, é que todas as coisas são feitas de átomos e que tudo o que as coisas vivas fazem pode ser entendido em termos de os *jiggings* e *wiggings* dos átomos."

Para entender o comportamento da matéria, dos seres vivos e todos os elementos do universo, é necessário utilizar uma ferramenta muito poderosa, chamada ciência. A ciência tem por objetivo, entre outros, investigar e compreender mecanismos naturais que poderão servir de base para o desenvolvimento de metodologias inovadoras, fármacos, novos materiais e diversos outros avanços. Para a prática científica, é possível utilizar uma abordagem teórica, com base apenas no conhecimento e modelos estabelecidos ao longo do tempo e, a partir deles, produzir novas descobertas. De outra maneira, pode-se utilizar os métodos experimentais, quando técnicas experimentais e equipamentos são elaborados sobre uma base teórica e utilizados a investigação de hipóteses e ideias com potencial para a produção de novos conhecimentos. Numa terceira abordagem, são as simulações em computador, utilizando uma base teórica, que permitem a criação de um novo ambiente dentro do universo computacional, ampliando a variabilidade dos testes experimentais que podem ser utilizados em uma investigação científica (Kaufmann e Smarr, 1992). No entanto, essa abordagem técnica-experimental utiliza diversos itens e equipamentos consumíveis, muitas vezes com altos custos. Porém, já é possível diminuir ou mesmo eliminar os custos experimentais com o uso da simulação de dinâmica molecular (DM).

2 | DINÂMICA MOLECULAR

Simulações de dinâmica molecular são técnicas bastante utilizadas para estudar o comportamento dos materiais, determinando o movimento dos átomos (Rapaport, 2004). Essas simulações podem prever o comportamento dos materiais em diferentes condições de temperatura, pressão e solvatação, sem a necessidade da realização de experimentos físicos (Alessandrini, 2015). Para isso faz-se necessário o uso de computadores. Atualmente, os computadores têm um papel importante na rotina de todos, mesmo quando tarefas simples precisam ser executadas. Em se tratando de ciência, além da teoria e dos experimentos as simulações por computador são consideradas atualmente o terceiro pilar importante do “fazer ciência” e aparecem como ferramentas poderosas, capazes de prever resultados de experimentos, principalmente daqueles que precisariam ser realizados em condições ambientais extremas, como altas temperaturas ou altas pressões. Simulações computacionais podem até mesmo fornecer a perspectiva dos custos de realização de um teste real (Hollingsworth e Dror, 2018).

Compreender e simular o comportamento dos átomos é uma tarefa importante na ciência dos materiais, fundamental para prever novas propriedades, desenvolver novos materiais e novos medicamentos. Por exemplo, enquanto a indústria farmacêutica gasta cerca de US \$ 50 bilhões anualmente na pesquisa de

fármacos, esse investimento resulta apenas em 20 novos medicamentos, em média (Munos, 2009). Assim, simulações em computador foram projetadas para acelerar o processo de desenvolvimento de medicamentos e outros materiais, visando a economia de tempo e dinheiro (Doshi e Hamelberg, 2015). A aceleração da pesquisa científica levou a recentes avanços na compreensão dos mecanismos moleculares e celulares da dor. Kasimova *et al.* 2014, por exemplo, obteve informações sobre a modulação do canal de íons dependentes Kv1.2 - canais celulares relacionados às vias de sinalização relacionadas à dor. Filizola, 2019 simularam o comportamento de alguns receptores e, com base na compreensão da interação receptor-ligante, propuseram novas abordagens mais eficientes para o uso de medicamentos opioides direcionados alívio de condições dolorosas.

Usando simulações de DM, um pesquisador pode obter informações sobre como um sistema real se comporta dentro do potencial de interação realista, mas para executar uma simulação de DM, algumas etapas precisam ser seguidas. A figura 1 apresenta esses passos: **1** - Usar um campo de força para o tipo de átomo; **2** - Calcular a força com base no campo de força; **3** - Integração numérica para calcular a velocidade e a posição do átomo.

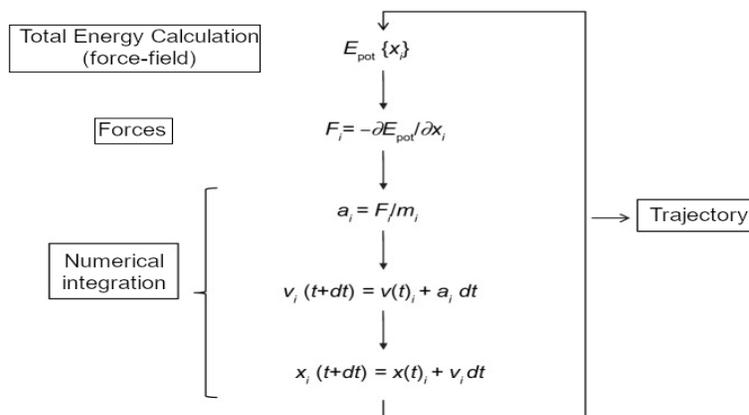


Figura 1: Dinâmica molecular e seus passos (Gelphi, 2015).

O potencial de interação desempenha um papel crucial nas simulações clássicas de DM. Esses potenciais são aproximações ou representações clássicas de potenciais quânticos. Como os núcleos são muito mais pesados que os elétrons (aproximação de Born-Oppenheimer), o movimento dos núcleos pode ser tratado independentemente do movimento dos elétrons. Assim, a trajetória das partículas (núcleos) é determinada pela paisagem de energia criada pelos elétrons. Geralmente, o cenário energético é descrito por expressões analíticas que dependem do tipo de interação. Por exemplo, o potencial de Morse é uma boa aproximação para a

interação entre dois átomos.

Em geral, as interações inter e intramoleculares são incorporadas através de expressões analíticas no potencial total de interação. O conjunto das expressões e de seus parâmetros é conhecido como campo de força. O potencial V a seguir, representa um campo de força que descreve o alongamento da ligação, deformações angulares e de torção (termos ligados), van der Waals e interações eletrostáticas (termos não ligados).

$$\begin{aligned}
 V = & \sum_{\text{bond}} K_r (r - r_0)^2 + \sum_{\text{angle}} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 \\
 & + \sum_{\text{torsion}} V_n [1 - (-1)^n \cos(n\phi + \gamma_n)] \\
 & + \sum_{i,j} 4\epsilon_{ij} [(\sigma_{ij}/r_{ij})^{12} - (\sigma_{ij}/r_{ij})^6] + q_i q_j / (4\pi_0 r_{ij})
 \end{aligned}$$

Para resolver o movimento das partículas, são necessários tamanhos de intervalo de tempo de 1 femtosegundo. O uso desse pequeno intervalo de tempo requer muitas etapas de integração para atingir um tempo realista da ordem de microssegundo – milissegundo. Enquanto o aumento da potência computacional (operações de memória e flutuantes por segundo) da escala *peta* para a *exa* escala (Fig. 2) pode permitir estudar sistemas maiores (10^{15} átomos) para tempos maiores, as abordagens paralelas atuais da DM baseadas em técnicas de computação de alto desempenho, como decomposição de domínio, ainda não são capazes de simular a escala de tempo microssegundo – milissegundo, mesmo para sistemas relativamente pequenos.

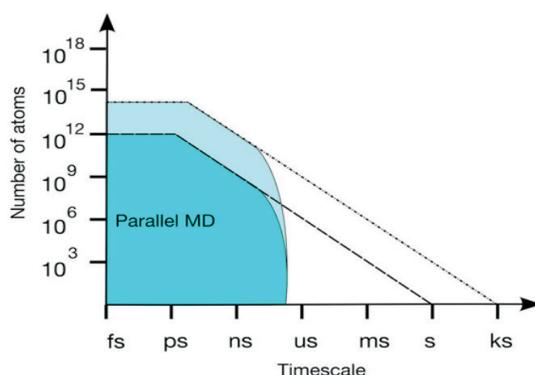


Figura 2: Escala da DM relacionando número de átomos e escala de tempo. (Perez, Huang e Voter, 2018).

O tempo de simulação é uma limitação dos métodos de DM, atualmente, é possível simular processos de até picossegundos - nanossegundos usando a DM clássica com quantidade limitada de átomos, enquanto as escalas de tempo em microssegundos - milissegundos não são atingidas para sistemas maiores (10^3 até 10^6) (Perez *et al.* 2009). A limitação na escala de tempo que pode ser alcançada pela DM está relacionada ao movimento muito rápido de átomos com períodos de vibração da ordem dos femtosegundos. Assim, para descrever o movimento atômico corretamente, são necessários intervalos de tempo de 1 femtosegundo, ou menos, para a integração numérica das equações de Newton. Para esse tamanho de etapa de tempo, são necessários um bilhão de etapas de integração para simular uma escala de tempo mais realista de 1 microssegundo (Uberuaga *et al.* 2005). A simulação de etapas tão grandes de integração é computacionalmente intensiva e pode ser proibitiva, mesmo para grandes supercomputadores.

Para resolver o problema do tamanho limitado da etapa em DM, diferentes estratégias foram propostas. As estratégias variam desde o uso da computação de alto desempenho para acelerar simulações DM até técnicas que tentam encontrar maneiras de fazer com que os átomos mudem de um estado para outro mais rapidamente, como *hyperdynamics* e *parallel replica* (Peng *et al.* 2018). Outra estratégia, proposta por Tewary (2009), utiliza a função de Green (técnica para resolver equações diferenciais) para resolver a equação de movimento de Newton. Este método de DM baseado na resolução da função de Green do sistema - denominada Dinâmica Molecular da Função de Green (GFMD) - foi aplicado para simular a propagação de um pulso mecânico em uma rede unidimensional de osciladores.

Apesar da grande extensão na escala de tempo das simulações DM obtidas pela técnica GFMD, e da promessa de ter resolvido o “problema de temporização na modelagem molecular”, a técnica não foi amplamente disseminada e usada pela comunidade científica. Um dos motivos é o custo computacional apresentado pelo GFMD, que é mais alto do que as técnicas tradicionais de integração comumente usadas nos códigos DM, como os esquemas *Verlet* ou *Leap-frog*. GFMD requer a diagonalização de uma matriz envolvendo as massas atômicas e os coeficientes de Taylor da expansão.

Existem outras técnicas para lidar com as limitações de tempo da DM. A dinâmica molecular acelerada (Voter, 1997; Voter *et al.* 2002) fornece meios de executar etapas de tempo maiores ou até mesmo “saltos” de tempo. Nesse caso, a trajetória do sistema é estimulada para encontrar um caminho para escapar de um mínimo do energético da configuração atômica mais rapidamente do que em uma simulação tradicional de DM (Voter *et al.* 2002).

No entanto, um sistema atômico com maior quantidade de átomos, que

está tentando atingir uma escala de tempo mais realista, não poderia ser simulado em um tempo de computação aceitável devido à limitação da dinâmica molecular, bem como à propagação do erro. Existem algumas limitações de DM implícitas em modelos matemáticos (Steinhauser e Hiermaier, 2009): **1-)** Condições de contorno artificiais: devido a uma limitação de memória do computador, alguns sistemas usam um limite periódico, este artifício pode levar a erros de interpretação da simulação. **2-)** Corte para interações de longo alcance: novamente, devido a uma limitação do poder computacional, as interações de longo alcance são cortadas, restringindo as interações dos átomos. **3-)** As simulações são clássicas: os átomos vibram em uma frequência muito alta, DM segue o clássico de Newton, forçando a etapa de simulação a estar mais próxima da frequência de vibração da matéria. Os elétrons estão no estado fundamental e os campos de força aproximados são aditivos de pares: não há elétrons explícitos DM, eles estão implícitos nos campos de força, isso pode limitar as possibilidades de simulação. **4-)** Tempo limitado de simulação: as bases DM estão na equação de movimento de Newton e as simuladas devem refletir um sistema real de átomos; portanto, são necessários vários pequenos passos de tempo (1fs) para simular um sistema realista.

A DM tem sido grande aliada dos estudos de alvos biológicos. Hanson *et al.* (2015) utilizaram, por exemplo, simulações de DM para entender o comportamento da molécula de capsaicina, um componente ativo das pimentas chili responsável pela picância. A capsaicina é uma molécula capaz de ativar receptores do tipo *TRPV1* (Receptores de Potencial Transiente Vanilóide do Tipo 1), canais iônicos sensíveis ao calor expressos em fibras neuronais não mielinizadas do tipo C. Com essa simulação, foi possível entender o papel da bicamada lipídica em um sistema que imita a membrana celular e, assim, compreender a interação capsaicina-TRPV1. Outro estudo investigou a interação de um receptor de neurônio específico, com um poderoso analgésico chamado fentanil, um opioide sintético 80-100 vezes mais forte que a morfina (Lipiński *et al.* 2019). A figura 3 mostra um dos resultados dessa pesquisa.

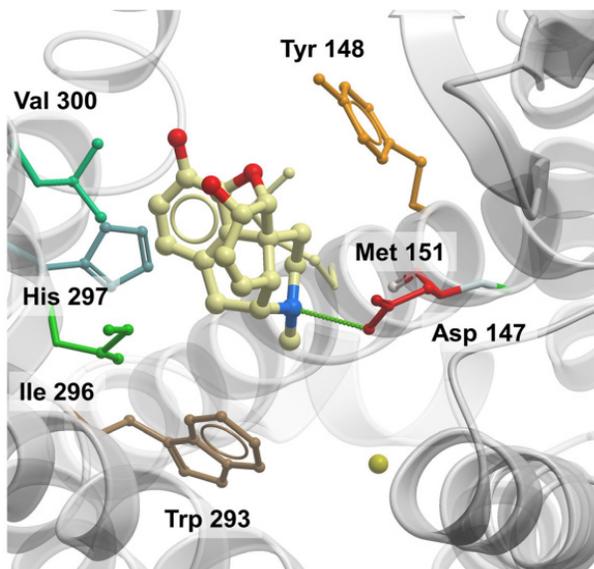


Figura 3: Simulação de uma molécula analgésica de fentanil interagindo na cavidade do receptor μ -opioid (Lipiński *et al.* 2019).

Para que seja possível utilizar a DM, lidar com uma grande quantidade de átomos, diversas interações, gravação dos estágios da simulação e diversos outros elementos, se torna necessário o uso de computadores de grande porte.

3 | COMPUTAÇÃO DE ALTO DESEMPENHO

A simulação de sistemas atômicos e moleculares complexos e grandes exige o uso de todo o recurso computacional disponível. Supercomputadores com grande número de unidades de processamento e memória também foram utilizados para resolver o problema de tempo de simulação DM (Fabregat-Travera *et al.* 2018). Muitas técnicas de *High Performance Computing* (HPC) podem ser aplicadas para permitir a utilização da potência computacional fornecida pelos supercomputadores. Essas técnicas de HPC são divididas em quatro grupos principais: memória compartilhada, memória distribuída, sistemas híbridos e sistemas heterogêneos.

Em geral, duas abordagens são usadas para obter alta potência computacional: **1-** aumentar o *clock* do processador, a capacidade da memória etc.; ou **2-** dividir a tarefa computacional em vários computadores (ou vários núcleos). A primeira abordagem requer um pequeno esforço dos programadores, porque as instruções do programa serão executadas mais rapidamente, mesmo sem alterações nos códigos do computador. No entanto, vários limites (físicos e técnicos) são grandes demais para serem transpostos em tempo hábil e alcançarem frequências mais altas. Por

esse motivo, a segunda abordagem pode ser mais rápida e barata, embora exija um esforço maior dos programadores para analisar as possibilidades de paralelismo, *design* e implementação, testar a correção e encontrar as melhores configurações de desempenho (Breshears, 2009).

A programação de memória compartilhada consiste em usar técnicas nas quais vários núcleos ou processadores compartilham a mesma memória. A comunicação entre os núcleos é feita através da memória do nó computacional e quando um dos processadores precisa de alguns dados que estão na memória, ele pode acessar isso diretamente. Essa técnica pode ser usada com várias bibliotecas e estruturas. Dois deles são a Interface do sistema operacional portátil (*POSIX*) e *OpenMP* (Gebali, 2011). O *POSIX* é uma família de padrões especificados pela *IEEE Computer Society* para manter a compatibilidade entre sistemas operacionais. Os *Threads POSIX* - diferentes linhas de processamento no mesmo processo do computador - consistem em um *API* para processos leves, seguindo o padrão *POSIX* (Mitchell *et al.* 2001).

Uma das bibliotecas que facilita o desenvolvimento de *software* paralelo é o *OpenMP*. Consiste em um *API* que facilita a programação de memória compartilhada (Chapman *et al.* 2007). Vários compiladores suportam a marcação que o *OpenMP* fornece, como: *GCC*, *XL* da IBM, entre outros. A implementação de códigos paralelos com o *OpenMP* consiste basicamente em áreas de marcação que devem ser paralelizadas. Com todas essas funcionalidades, o *OpenMP* parece ser uma solução ideal para a maioria dos casos em que é necessário aumentar o uso computacional e reduzir o tempo de processamento. No entanto, é necessário planejar e analisar os algoritmos a serem implementados. À primeira vista, *OpenMP* resolve qualquer problema de paralelismo de marca única. Em aplicativos bem projetados, a inserção de *OpenMP* tem a característica de ser bem-sucedida e ainda simples (Chapman *et al.* 2007). No entanto, como a complexidade do paralelismo é entregue à biblioteca, pode-se esperar o uso de alguns ciclos para resolver o que deve ser processado e onde.

Dado esse fato, é de se esperar uma pequena variação no desempenho, dependendo do tipo de problema e do número de *threads* para resolvê-lo. De qualquer forma, todas as funcionalidades do *OpenMP* têm grande valor em um contexto fechado de um computador (com a possibilidade de múltiplos núcleos). Para cenários em que não é possível adicionar mais núcleos de processamento a um computador, a solução *OpenMP* é limitada. Para resolver a limitação, existem outros modelos de programação para distribuir a carga computacional. No entanto, essa carga será distribuída entre vários computadores. Com as configurações feitas consistentemente no ambiente usado e o problema em foco, os modelos de programação diminuem o tempo total de execução. Portanto, as técnicas de

computação de alto desempenho dependem totalmente do domínio do aplicativo e, se aplicadas erroneamente, podem aumentar o tempo de execução.

No modelo distribuído, os computadores não trocam dados através do sistema de memória, mas através de um barramento específico da comunicação. Para possibilitar a comunicação, é necessário um protocolo para definir como as mensagens serão. Além do protocolo, é necessário usar uma tecnologia de comunicação. Portanto, o cenário se repete como no caso do *POSIX Thread versus OpenMP*. No entanto, neste caso, a competição é entre *Sockets* e *MPI*. O *MPI* consiste em um protocolo de comunicação padronizado específico para processamento distribuído com várias implementações (Hager e Wellein, 2010). Usando o *MPI*, é possível que vários computadores troquem mensagens. Entre as várias implementações estão o *OpenMPI* e o *mvapich*. Todas as implementações seguem um protocolo que estabelece o formato das mensagens. A troca de mensagens relata vários itens relevantes para a tarefa, como qual processo está enviando a mensagem e que tipo de dados serão processados. Toda essa informação estabelece que cada nó que recebe as mensagens saberá como proceder. No entanto, os computadores interconectados ainda podem conter vários processadores (ou vários núcleos). Nesse novo cenário, é necessária uma abordagem diferente para usar totalmente a capacidade computacional. Em um cenário em que existem vários computadores e em que cada computador possui vários processadores ou núcleos, é necessário um cuidado especial para distribuir as tarefas para cada nó.

Cada nó tem vários processadores conectados por uma rede. Dessa forma, cada nó pode receber tarefas e segmentá-las para que cada processador receba parte dessa carga de processamento (Hager e Wellein, 2010). Nesse modelo híbrido, é necessário explorar o máximo de cada nó e até dividir a tarefa entre diferentes máquinas. O *MPI* fornece a forma de comunicação entre os processos (que estarão em máquinas diferentes) e o *OpenMP* fornece as características para que vários núcleos de processamento recebam partes dessa tarefa. Essa abordagem é pertinente porque o número de núcleos por máquina está aumentando e ainda existem várias limitações para criar um computador com muitos núcleos. A abordagem híbrida é mais comumente aplicada em pacotes de simulação de dinâmica molecular como *LAMMPS* (in 't Veld *et al.* 2008) e *softwares* de mecânica quântica como *Quantum ESPRESSO* (Giannozzi *et al.* 2009) e *VASP* (Sun *et al.* 2003).

Existem várias maneiras de aplicar essas técnicas de computação nas simulações de DM. Na decomposição de domínio, os átomos e suas contrapartes não conectados são distribuídos entre os processadores. Todas as coordenadas atômicas são distribuídas antes de calcular as interações e, após o cálculo das forças, suas novas posições também são distribuídas (transmissão). Essa técnica é

caracterizada pela grande comunicação entre processos e *threads*. Nesse cenário, o uso de arquiteturas com muitos núcleos ou sistemas híbridos pode ser de grande valor devido ao número de processadores disponíveis. Como a comunicação entre processadores é baseada em barramentos e não em redes, o tempo de comunicação é definido por $O(N)$. Na decomposição por força, é feita uma divisão de blocos da matriz que representa todas as combinações de pares de átomos. Dessa maneira, a comunicação na transmissão anterior é evitada por uma comunicação mais seletiva. No entanto, a geração de tais blocos tem um custo computacional. Nesta etapa, os sistemas heterogêneos têm mais vantagens porque usam dois tipos de arquitetura, muitos núcleos e múltiplos núcleos. Assim, os cálculos de separação da matriz e o cálculo da simulação podem ser feitos na arquitetura mais conveniente, com um tempo de comunicação de $O(N/\sqrt{p})$, onde p é o número de processadores. Na decomposição espacial, a região geométrica da simulação é dividida e processada em um nó. Em certos casos, é necessária a migração entre as regiões, o que requer comunicação entre os nós. Portanto, em sistemas heterogêneos, essa abordagem tem ganho computacional devido à diversidade de tipos de processadores com um tempo de comunicação $O(N/p)$.

Cada uma das três técnicas tem custos de comunicação diferentes. O custo computacional da comunicação entre os nós de processamento e *cores* deve ser proporcional ao custo computacional do processamento. Portanto, o tempo usado para dividir e executar a comunicação da tarefa nas três abordagens acima deve sempre ser menor que o tempo de processamento das forças, posições etc. Essas três maneiras aceleram o DM globalmente, ou seja, o algoritmo paralelo consiste em dividir as etapas da DM em vários *threads*, processos ou computadores. No entanto, em cada etapa, existem algoritmos que podem acelerar a simulação.

Outra maneira de fornecer uma simulação de DM mais rápida é usando *hardware* com arquiteturas diferentes da CPU comum. *Hardware* com muitos núcleos pode ser usado para alcançar tempos mais realistas (Stone *et al.* 2017). As arquiteturas atuais de vários núcleos possuem muitos processadores, como o Nvidia Tesla C1060 com 240 núcleos e o Intel Xeon Phi Coprocessor 7120X com 61 núcleos com 4 *threads* cada. Na arquitetura GPU, é possível notar que há uma grande especialização no aspecto da computação intensiva (vínculo de CPU). No caso do Xeon Phi, que mostra características semelhantes às da GPU, os processadores são dedicados ao processamento de vetores e à baixa troca de dados pela memória externa do Xeon Phi.

O acesso a GPU e ao Xeon Phi é feito de maneira semelhante ao *OpenMP*. Certas áreas dos códigos estão marcadas para serem executadas nesses dispositivos. Existem vários estudos sobre quais partes dos códigos devem ser executadas nas arquiteturas *many-core* e *multicore*. Zhu *et al.* (2013), Shkurti

et al. (2013) e Hou e Ge (2012) apresentam um conjunto de algoritmos de DM adaptados ao sistema GPU, além de mostrar um sistema de separação dos átomos para maximizar o uso como GPU, cada trabalho descreve os meandros necessários para o problema de destino. Com isso, os sistemas heterogêneos devem poder determinar qual opção de arquitetura é melhor para cada parte do código. O trabalho de (Kutzner *et al.* 2015) demonstra que o GPU possui ganhos quando comparado com as CPUs em vários cenários. Isso demonstra a necessidade de usar a arquitetura *many-core*. Dessa maneira, o uso computacional aumenta e o tempo computacional diminui nas arquiteturas corretas. Todos esses modelos computacionais, junto à dinâmica molecular, se apresentam como uma ferramenta muito poderosa para a entendimento e descoberta de novos fármacos potenciais, materiais e mesmo vacinas. Essas técnicas podem ser utilizadas para que seja possível obter avanços em diversas áreas.

REFERÊNCIAS

ALESSANDRINI, V. Shared Memory Application Programming: Concepts and Strategies in Multicore Application Programming. Amsterdam. Elsevier Science, 2015

BRESHEARS, C. The Art of Concurrency: A Thread Monkey's Guide to Writing Parallel Applications. Sebastopol. O'Reilly Media, 2009.

PEREZ, D., HUANG R., e VOTER A. F. Long-time molecular dynamics simulations on massively parallel platforms: A comparison of parallel replica dynamics and parallel trajectory splicing". In: Journal of Materials Research 33.7 2018 ,813–822

CHAPMAN, B. *et al.* Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming (Scientific and Engineering Computation) Scientific and Engin Edition. Massachusetts. The MIT Press, 2007

DOSHI, U. e HAMELBERG, D. Towards fast, rigorous, and efficient conformational sampling of biomolecules: Advances in accelerated molecular dynamics. **Biochimica et Biophysica Acta**. v. 1850, n. 5, p. 878 – 888, 2015.

DURRANT, J. *et al.* Molecular dynamics simulations and drug discovery. **BMC Biology**. v. 9, n. 1, p. 71, 2011.

FABREGAT-TRAVERA, D. *et al.* Accelerating molecular dynamics codes by performance and accuracy modeling. **Journal of Computational Science**. v. 2, p. 77-90, 2018.

FILIZOLA, M. Insights from molecular dynamics simulations to exploit new trends for the development of improved opioid drugs. **Neuroscience Letters**. v. 700, p. 50-55, 2019.

GEBALI, F. Algorithms and parallel computing. New York. Wiley, 2011.

GIANNOZZI, P. *et al.* QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. **Journal of Physics: Condensed Matter**. v. 21, n. 39, p. 395502 (19pp), 2009.

HAGER, G. e WELLEIN, G. Introduction to high performance computing for scientists and engineers. London. Taylor & Francis, 2010.

HANSON, S. Â. M. *et al.* Capsaicin interaction with TRPV1 channels in a lipid bilayer: molecular dynamics simulation. **Biophysical Journal**. v.108, n. 6, p. 1425 - 1434, 2015.

HOLLINGSWORTH, S. A. e DROR, R. O. Molecular dynamics simulation for all. **Neuron**. v. 99, n. 6, p. 1129 - 1143, 2018.

HOU, C. e GE, W. GPU-accelerated molecular dynamics simulation of solid covalent crystals. **Molecular Simulation**. v. 38, n. 1, p. 8-15, 2012.

IN'T VELD, P. J. *et al.* Accurate and efficient methods for modeling colloidal mixtures in an explicit solvent using molecular dynamics. **Computer Physics Communications**. v. 179, n. 5, p. 320-329, 2008.

KASIMOVA, M. A. *et al.* Voltage-gated ion channel modulation by lipids: Insights from molecular dynamics simulations. **Biochimica et Biophysica Acta – Biomembranes**. v. 1838, n. 5, p. 1322 – 1331, 2014.

KAUFMANN, W. J., e SMARR, L. L. **Supercomputing and the transformation of science**. New York: W. H. Freeman & Co, 1992

KUTZNER, C. *et al.* Best bang for your buck: GPU nodes for GROMACS biomolecular simulations. **J. Comput. Chem**. v. 36, n. 26, p. 1990-2008, 2015.

LIPIŃSKI, P. F. J. *et al.* Molecular dynamics of fentanyl bound to μ -opioid receptor. **Journal of Molecular Modeling**. v. 25, n. 144, p. 1-17, 2019.

MITCHELL, M. *et al.* Advanced Linux programming. New Riders. Indiana, 2001.

MUNOS, B. Lessons from 60 years of pharmaceutical innovation. **Nature Reviews Drug Discovery**. v. 8, n. 12, p. 959-968, 2009.

PENG, X. *et al.* Integrating multiple accelerated molecular dynamics to improve accuracy of free energy calculations. **J. Chem. Theory Comput**. v. 14, n. 3, p. 1216–1227, 2018.

PEREZ, D. *et al.* Chapter 4 - Accelerated Molecular Dynamics Methods: Introduction and Recent Developments. editor Ralph A. Wheeler, Annual Reports in Computational Chemistry, Elsevier, v. 5, p.79 - 98, 2009.

RABENSEIFNER, R. *et al.* Hybrid MPI/OpenMP parallel programming on clusters of multi-Core SMP nodes. v. 1, p. 427-436, 2009. Published in: 2009 17th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-based Processing.

RAPAPORT, D. C. **The Art of Molecular Dynamics Simulation**. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 2004.

SHKURTI, A. *et al.* Acceleration of coarse grain molecular dynamics on GPU architectures. **Journal of Computational Chemistry**. v. 34, n.10, p.803-818, 2013.

STEINHAUSER, M. O. e HIERMAIER, S. A review of computational methods in materials science: Examples from shock-wave and polymer physics. **International Journal of Molecular Sciences**. v. 10, n. 12, p. 5135–5216, 2009.

STONE, J. E., *et al.* Chapter 11 - GPU-accelerated molecular dynamics clustering analysis with OpenACC. Rob Farber. In: *Parallel Programming with OpenACC*, publisher "Morgan Kaufmann, Boston, p. 215 - 240, 2017.

SUN, G. Y. *et al.* Performance of the Vienna *ab initio* simulation package (VASP) in chemical applications. **Journal Of Molecular Structure: THEOCHEM**. v. 624, p. 37-45, 2003.

TEWARY, V. K. Extending the time scale in molecular dynamics simulations: Propagation of ripples in graphene. **Phys. Rev. B**. v. 80, n. 16, p.161409 1-4, 2009.

GELPHI *et al.* Molecular dynamics simulations: advances and applications. In:**Adv Appl Bioinform Chem**. v. 8 p. 37-47, 2015

UBERUAGA, B. P. *et al.* Accelerated molecular dynamics methods. editor="Yip, Sidney", In: *Handbook of Materials Modeling: Methods*, Springer Netherlands, p. 629-648, 2005.

VOTER, A. F. A method for accelerating the molecular dynamics simulation of infrequent events. **JCP**. v.106, p. 4665-4677, 1997.

VOTER, A. F. *et al.* Extending the time scale in atomistic simulation of materials, **Annu. Rev. Mat. Res**. v.32, p. 321, 2002.

ZHU, Y. *et al.* GALAMOST: GPU-accelerated large-scale molecular simulation toolkit. **Journal of Computational Chemistry**, v. 34, n. 5, p. 2197-2211, 2013.

ÍNDICE REMISSIVO

A

Acessibilidade 41, 63
Aguapé 180, 181, 184, 185, 187, 188, 190, 191
Águas Pluviais 176, 177, 178, 179
Amido 95, 97, 98, 99, 104, 107, 115
Auditiva 39, 40, 41, 42, 51, 52

B

Bacia hidrográfica 169, 177
Balanço hídrico 169
Biodegradação 95, 97, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 108, 109, 110, 111, 112, 114, 115
Biofiltros 183
Blenda 95, 99, 100, 102, 104, 110, 112
Buriti 137, 138, 139, 140, 141, 144, 146, 147, 148, 149, 150, 151

C

Campo Eletromagnético 66, 67, 68, 79, 80, 81
Coliformes 180, 182, 189, 190
Computadores 27, 32, 33, 34, 35, 86
Computer 1, 2, 14, 26, 33, 37, 85
Condutividade 180, 185, 187
Contaminada 182
Corrente elétrica 61, 66, 67, 80, 81, 152, 164
COVID-19 1, 8, 9, 13

D

Dados demográficos 172
Deep Learning 2, 11, 12
Deficiência 39, 40, 41, 42, 50, 51, 52
Degradação 95, 97, 99, 100, 102, 104, 108, 109, 113, 114, 152, 155, 162, 175, 177
Dermocosméticos 138, 139, 150, 151
Desempenho 26, 29, 30, 32, 33, 34, 64, 68, 83, 88, 89, 91, 92, 93, 124, 126, 127, 184
Dinâmica Molecular 26, 27, 28, 30, 31, 34, 36

Disaggregation of loads 14, 24
Dispositivo 39, 40, 41, 44, 45, 47, 48, 49, 50, 51, 55
Drenagem 168, 170, 171, 172, 175, 176, 177, 178, 179

E

Embalagem 152, 154, 155, 156, 159
Emulsão 137, 142, 143, 144, 147
Estabilidade 137, 140, 141, 142, 143, 144, 145, 146, 147, 148, 150
Experiências 40, 60, 64

F

Faturamento 53, 54, 55, 56, 57, 60, 61, 64
Filtração 122, 180, 181, 182, 183, 184, 185, 186, 187, 188, 189, 190, 191

H

Health 1, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 149, 181

I

Internet 2, 3, 5, 6, 11, 15, 25, 56, 58

M

Machine Learning 2, 10
Manufatura 83, 85, 87, 92, 93
Medidores 55, 56, 57, 58, 59, 60, 63, 64
memória 29, 31, 32, 33, 34, 35, 48
Microrreatores 83, 84, 85, 87, 88, 89, 90, 91, 92, 93

N

Neural Networks 2, 14, 15, 24

O

Órteses 41

P

Pandemic 1, 8, 9, 10
Polímeros 97, 98, 115, 167
Processos 25, 30, 33, 34, 35, 55, 84, 85, 86, 97, 102, 116, 118, 121, 128, 132, 165, 177, 183, 192
Protótipo 39, 50, 51, 83, 86, 155, 156, 160, 165

R

Reciclagem 118, 152, 153, 154, 155, 159, 165, 166, 167

S

Saponificação 83, 88, 89, 94

Simulação 26, 27, 28, 30, 31, 32, 34, 35, 81, 134, 192

Smart Grid 14, 15, 24, 25, 65

T

Tecnologia assistiva 39, 40, 51

Telecommunications 1, 2, 4

Telemedicine 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13

U

Urbana 168, 169, 170, 171, 172, 174, 175, 176, 177, 178, 179

V

Viscosidade 137, 143, 147, 148, 149

www.atenaeditora.com.br 
contato@atenaeditora.com.br 
[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 
www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

Engenharia Moderna: Soluções para Problemas da Sociedade e da Indústria

www.atenaeditora.com.br 
contato@atenaeditora.com.br 
[@atenaeditora](https://www.instagram.com/atenaeditora) 
www.facebook.com/atenaeditora.com.br 

Engenharia Moderna: Soluções para Problemas da Sociedade e da Indústria