

# Seminari Informal de Matemàtiques de Barcelona

---

**Speaker:** Bernat Anton Martos.  
**Universitat:** Grup de Recerca en Informàtica Biomèdica, Parc de Recerca Biomèdica de Barcelona.

**Data:** dilluns 10 de desembre de 2012.

**Horari:** 12:15, *coffee break*; 12:30, xerrada.

**Lloc:** Aula IMUB (al terrat), Facultat de Matemàtiques de la UB.

**Títol:** Structural biomathematics: an overview of molecular simulations and protein structure prediction.

**Resum:** Since the complete sequentiation of the human genome (2001), the fields of genomics and proteomics have enormously grown due to the scientific and technical advances of the last decade. The purpose of this talk will be to give a generic introduction to the mathematical tools that are used in structural biology.

A brief introduction to biomathematics will be given, specifically those applied in the fields of molecular simulations and protein structure prediction. In the first case, we will see the complexity of the computations involved in a simulation. For the latter, a maximum entropy method for amino acid coevolution's noise removal will be explained in detail, together with the necessary tools to understand this state of the art method for prediction of protein folding.

---

**Qui som?** El SIMBa és un seminari jove organitzat per estudiants de doctorat de matemàtiques. Està dirigit a estudiants de doctorat, de màster i, fins i tot, dels darrers cursos de grau. El nostre objectiu és donar a conèixer la recerca que estem fent, així com adquirir coneixements d'altres àrees de les matemàtiques diferents de la pròpia.

Més informació a [www.imub.ub.es/simba](http://www.imub.ub.es/simba).