

Desarrollo de un modelo computacional serial y paralelo en un contexto de HPC para el estudio de los mecanismos básicos de electroporación y sus aplicaciones en salud y alimentos

Alumno	Mauricio Alfonso (LU 65/09)	mauricio.alfonso.88@gmail.com
Director	Alejandro Soba	soba@cnea.gov.ar
Codirector	Guillermo Marshall	marshallg@arnet.com.ar

La exposición de células biológicas a campos eléctricos pulsantes (PEF) resulta en un aumento de la permeabilidad de la membrana de las células, fenómeno denominado electroporación (EP). La EP es ampliamente utilizada en aplicaciones en salud y en alimentos. El objetivo específico de mi plan de tesis de licenciatura es desarrollar un modelo computacional serial y paralelo genérico en un contexto de HPC para el estudio de los mecanismos básicos de electroporación y sus aplicaciones en salud y alimentos. En particular, dado que la EP es un fenómeno a nivel celular intentaré entender mejor el comportamiento de la membrana celular y el transporte iónico simulando una célula esférica sometida a PEF por medio de dos electrodos. Se asumirá que la célula está constituida por cuatro especies iónicas: el ión hidrógeno (H^+), el hidróxido (OH^-), el catión sodio (Na^+) y el cloruro (Cl^-). Se analizará la creación de poros en la membrana celular y el transporte de masa a través de los mismos. El modelo computacional resuelve numéricamente un sistema de ecuaciones en derivadas parciales no lineales que describen la evolución espacio-temporal del transporte iónico, el campo eléctrico, la creación de poros y variación de tamaño de los mismos, por medio de las ecuaciones de Nernst-Planck [1], de Poisson [4], de DeBruin y Krasowska [5] y de Smoluchowski, respectivamente, en un dominio espacial plano y el tiempo. El programa será desarrollado desde cero en C++ utilizando el paradigma de programación orientada a objetos. Para la discretización espacial del dominio en coordenadas cilíndricas se utilizará una malla bidimensional de elementos finitos cuadriláteros [2, 3] con los electrodos dentro del dominio y tres materiales diferentes: el líquido extracelular, la membrana celular y el líquido intracelular. Para la discretización temporal se utilizarán diferencias finitas. En la implementación computacional se utilizará programación serial y paralela. La complejidad computacional de este tipo de sistemas implica grandes volúmenes de cálculo por lo que se utilizará programación paralela en un cluster Beowulf. Se utilizará el paradigma de pasaje de mensajes y OpenMP y se llevará a cabo un estudio del speed up y la performance del sistema y se intentará obtener

escalabilidad. Para ello se utilizarán las bibliotecas Eigen [6] para álgebra lineal en C++, MPICH [7] y OpenMP [8]. Con los resultados de la simulación computacional a nivel celular, en salud, espero optimizar los protocolos para aumentar la eficiencia de la EP y posiblemente disminuir los efectos adversos; en el procesamiento de alimentos por PEF espero maximizar la eficiencia de extracción y minimizar el costo de producción. El objetivo general es profundizar a través de la modelación matemática computacional el conocimiento de los mecanismos bioelectroquímicos que subyacen a la EP.

Referencias

- [1] Qiong Zheng, Duan Chen and Guo-Wei Wei *Second-order Poisson Nernst-Planck solver for ion channel transport* Journal of Computational Physics Volume 230, Issue 13, 10 June 2011, Pages 5239–5262
- [2] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor *The Finite Element Method Volume I: The Basis* Butterworth-Heinemann, 5th edition, 2000
- [3] Stanley Humphries, Jr. *Finite-element Methods for Electromagnetics* 2010
- [4] Jianbo Lia, Wenchang Tanb, Miao Yua, Hao Lina *The effect of extracellular conductivity on electroporation-mediated molecular delivery* Biochimica et Biophysica Acta 1828 (2013) 461–470
- [5] Wanda Krassowska and Petar D. Filev *Modeling Electroporation in a Single Cell* Biophysical Journal Volume 92, Issue 2, 15 January 2007, Pages 404–417
- [6] Eigen <http://eigen.tuxfamily.org/>
- [7] MPICH High Performance Portable MPI <http://www.mpich.org/>
- [8] OpenMP <http://openmp.org/wp/>