**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**

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 específicos 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, de Poisson, de DeBruin y Krassowska y de Smoluchowski, respectivamente, en un dominio espacial plano y el tiempo. Para la discretización espacial del dominio en coordenadas cilíndricas se utilizará una malla bidimensional de elementos finitos cuadrilaterales 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 Open MP 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 METIS (<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>), MPI Fortran; MPI C/C++; MPI OpenMP Fortran; MPI OpenMP C/C++. 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.