

Trabajo Fin de Grado / Trabajo Fin de Máster

Método Paralelo para Resolver las Ecuaciones de Ligadura de Moléculas con Ramificaciones Laterales Aisladas

Palabras clave: bioinformática, dinámica molecular, imposición de ligaduras, SHAKE, LINCS, ILVES.

Descripción: La dinámica molecular es una técnica de simulación por computador que estudia la evolución en el tiempo de un sistema de partículas. Se ha aplicado con éxito, por ejemplo, al diseño de nuevos fármacos o al análisis de materiales. En este campo, imponer ligaduras, es decir, fijar las longitudes de los enlaces atómicos, es una práctica habitual que permite aumentar el paso temporal de simulación. De esta forma se pueden acelerar los experimentos o simular mayores intervalos temporales. Sin embargo, los algoritmos más usados para imponer ligaduras convergen linealmente y están basados en aproximaciones que afectan a su estabilidad numérica. Además, no se conoce una implementación paralela eficiente de los mismos.

El objetivo principal de este trabajo es implementar una versión del algoritmo de imposición de ligaduras ILVES que se pueda ejecutar de forma vectorial por varios núcleos. Para acotar la complejidad del problema, se abordará la resolución de las ecuaciones de ligadura de una molécula compuesta por una cadena lineal de átomos con ramificaciones laterales aisladas. Se partirá de una solución ya disponible para una molécula compuesta por una cadena lineal de átomos que utiliza el método del complemento de Schur para dividir el sistema de ecuaciones en varios subsistemas susceptibles de ser resueltos de forma vectorial y paralela.

Para más información, contactar con Jesús Alastruey Benedé (jalastru@unizar.es)

