



SCIENTIFIC COMPUTING:

UN EJEMPLO EN DINÁMICA MOLECULAR

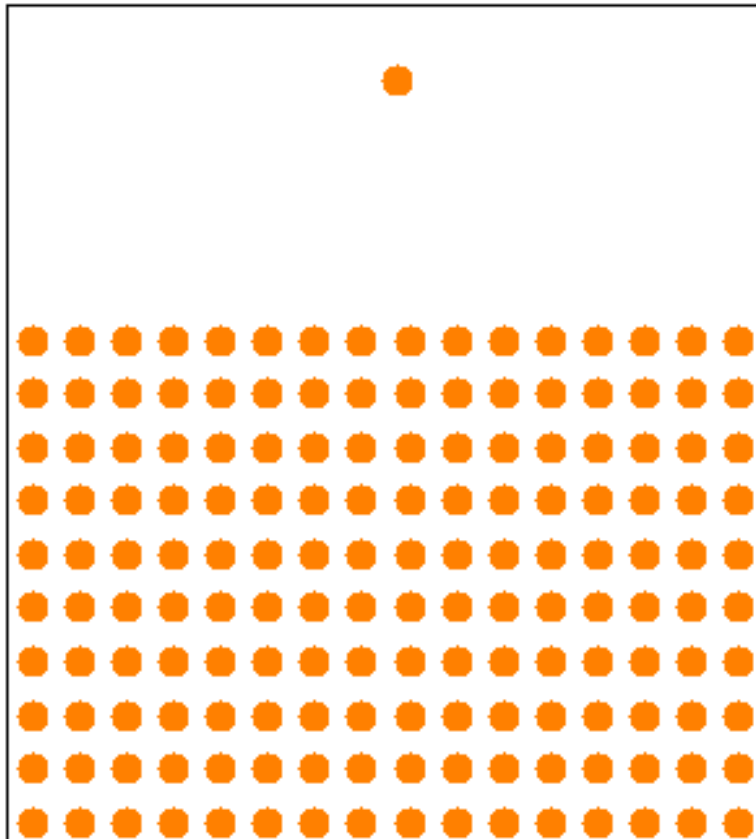
Dinámica Molecular (MD)

- Las moléculas son sistemas dinámicos.
- Los átomos interactúan entre sí creando sistemas vivos.
- La simulación por ordenador es una herramienta teórico-práctica básica para estudiar estas interacciones.
- Nos proporciona un «microscopio» a nivel atómico.



Dinámica Molecular

time 0.0041 ps



Ejemplo de simulación consistente en arrojar un átomo de cobre con 1 eV de energía cinética sobre una superficie de cobre.

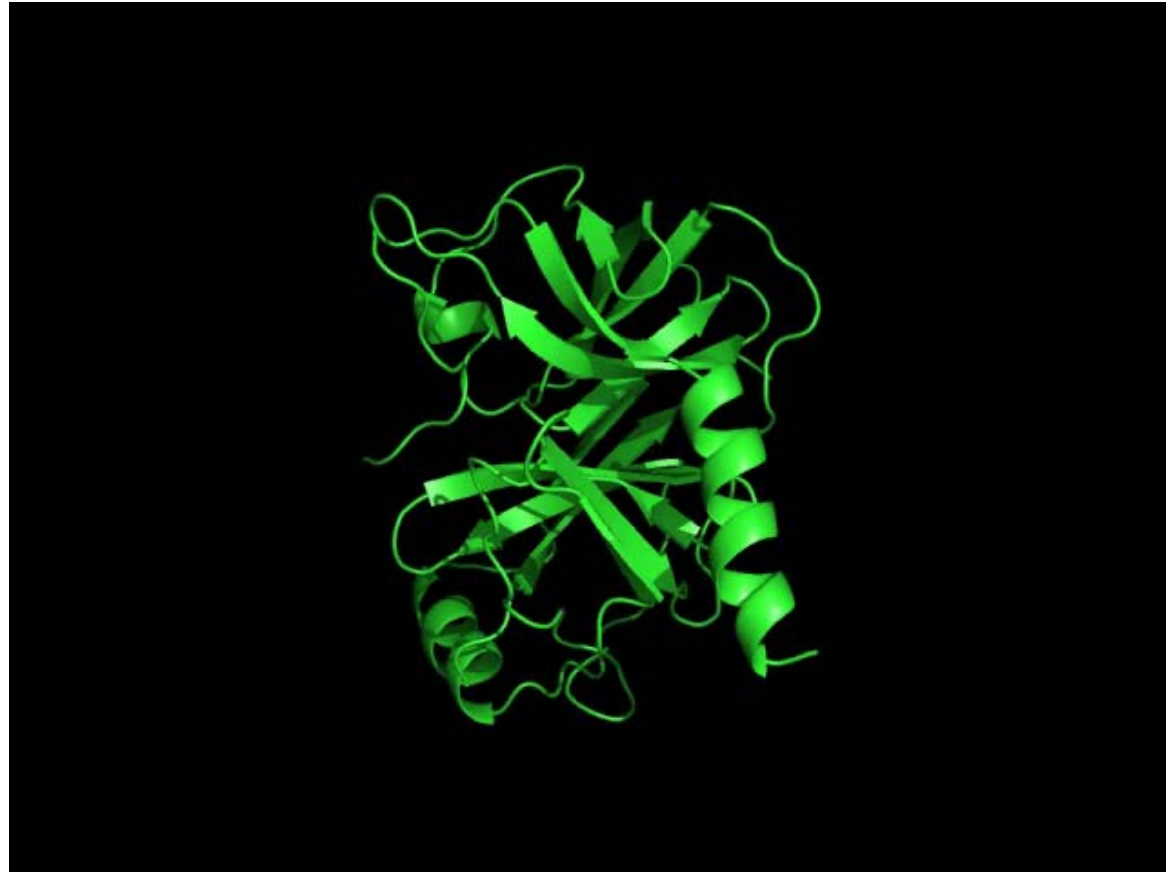


Motivación para el proyecto

- Existen diversos tipos de MDS
- En este caso se trata de MD de las proteínas
- Concretamente el estudio de la proteasa NS3, responsable de la transmisión de la hepatitis C
- Se desea conocer el mecanismo de ruptura de dicha proteína



La proteína NS3



UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

José Manuel Sota Eguizábal
Dpto. de Matemáticas y Computación

CESGA
HPCN
High Performance Computing and Networking
WORKSHOP
2010

Complejidad de la simulación

- N átomos, N^2 interacciones, $O(N^2)$
- Paso de tiempo 1 a 10 fs (femtosegundo = 1 mil billonésima de segundo)
- Suelen simularse reacciones en tiempos cortos (~ 100 ps, picosegundo = billonésima de segundo)



Complejidad de la simulación

- Se pueden utilizar varios tipos de modelos dinámicos:
 - Dinámica de Newton
 - Dinámica Cuántica
 - Modelos mixtos
- Las leyes clásicas generan menos complejidad computacional
- En media pueden suponer de 10.000 a 100.000 pasos de integración



En nuestro caso...

- La proteína se compone de unos 3.000 átomos
- Se considera introducida en agua, lo que eleva la cifra a unos 30.000 átomos
- Este tipo de proyecto puede suponer unas 60.000 horas de cálculo en un centro de computación (3 meses aprox.)
- Y pese a todo se considera un problema pequeño...



Nuestro proyecto...

- Se trata de un problema con alta carga de tiempo de computación
- En La Rioja no hay ningún centro dedicado, y la Universidad no tiene recursos suficientes
- Solución: buscar un método **eficiente** y **económico** para poder realizar los cálculos



Nuestro proyecto...

- El software utilizado por el grupo de investigación es GROMACS
- Las dos vías de actuación para acelerar los cálculos son:
 - Acelerar el software con el uso de las GPUs (Unidad de procesamiento gráfico)
 - Aumentar el número de equipos utilizando el software



Nuestro proyecto

- Las vías de actuación a elegidas son:
- Utilizar computación distribuida:



- Encontrar usuarios dispuestos a hacer uso de dicho desarrollo:

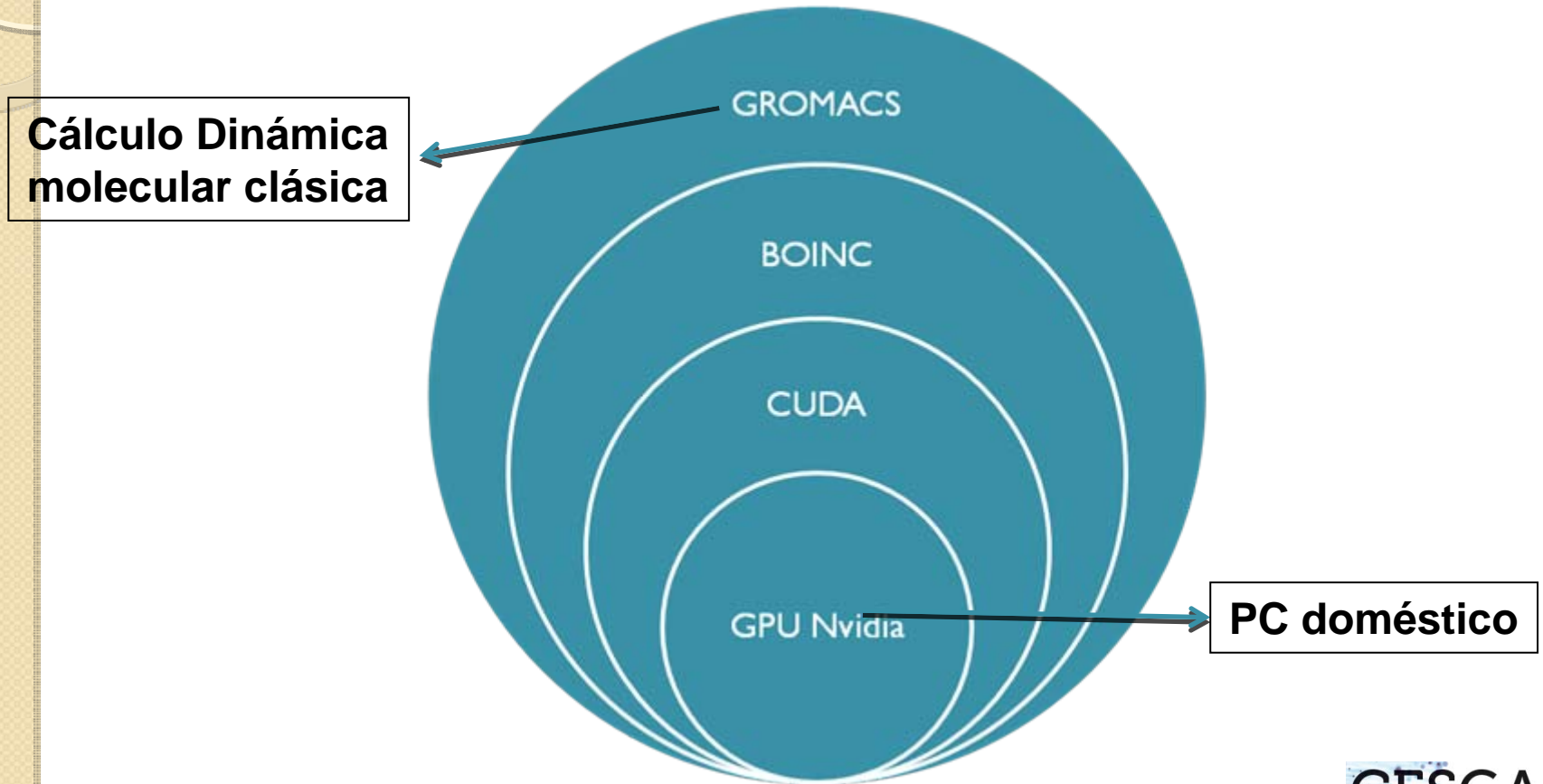


Participantes

- Universidad de La Rioja
 - Dpto. de Matemáticas y Computación
 - Grupo de programación y Cálculo Simbólico (PSYCOTRIP)
 - Dpto. de Química
 - Grupo de Cinética y Dinámica de reacciones químicas
- Knet Comunicaciones, S.L.



Software

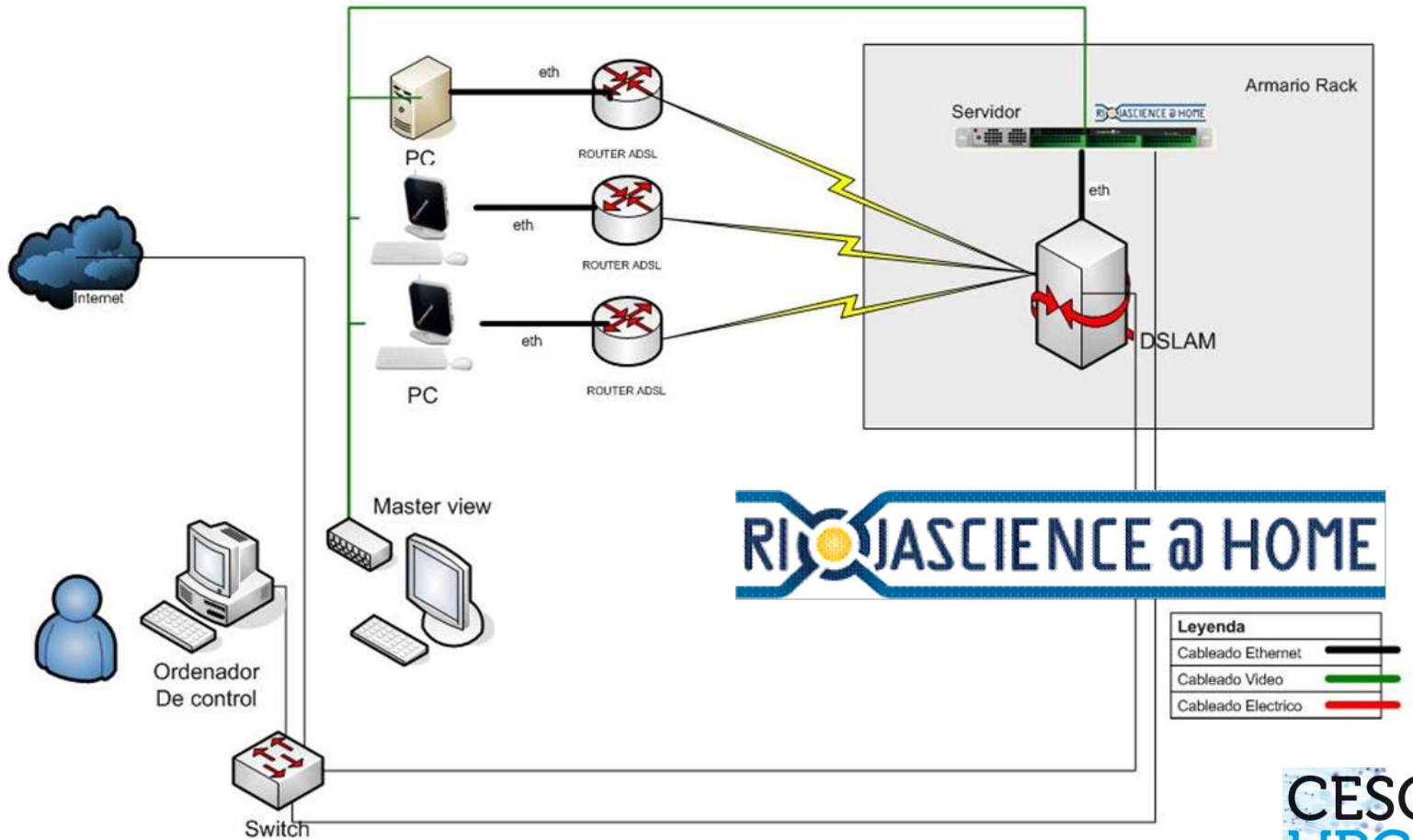


**Cálculo Dinámica
molecular clásica**

PC doméstico



Hardware



Conclusiones

- Estructura asequible y centralizada, sencilla de gestionar
- Colaboración Universidad-Empresa para mejora de la investigación
- Responsabilidad social por parte de las empresas de la región
- Implicación de la sociedad para su propio beneficio



Gracias por su atención



UNIVERSIDAD DE LA RIOJA

José Manuel Sota Eguizábal
jose.sota@fund.unirioja.es
<http://www.unirioja.es>