



T842

DESENVOLVIMENTO DE ALGORITMOS PARALELOS PARA PROCESSAMENTO NUMÉRICO DE ARRANJOS ATÔMICOS EM PROTEÍNAS

Vitor Hugo Almeida Marques (Bolsista PIBIC/CNPq), Renato Torres (Estagiário Embrapa), Michel E. B. Yamagishi (Pesquisador Embrapa) e Prof. Dr. Marco Aurélio Amaral Henriques (Orientador), Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação - FEEC, UNICAMP

Este projeto propõe a utilização de uma plataforma de processamento maciçamente paralelo virtual para o desenvolvimento de algoritmos paralelos aplicados ao cálculo de área e volume de moléculas de proteínas disponíveis em detalhes em bases de dados públicas tais como o Protein Data Bank (PDB). Tais algoritmos são conhecidos pelo grande volume de cálculo que exigem, não podendo ser executados eficientemente em sistemas computacionais convencionais. Neste trabalho, o processamento destes algoritmos é feito na plataforma de software maciçamente paralelo JoiN, a qual procura utilizar o poder computacional ocioso de muitos computadores interligados pela Internet. Após a implementação e a otimização de uma versão seqüencial em Java dos algoritmos, são estudadas várias formas de paralelização dos mesmos acompanhadas por testes que avaliam parâmetros tais como número de tarefas, número de processadores e localização física dos dados, dentre outros. Os resultados obtidos mostram que a implementação destes algoritmos é compatível com o modelo de computação maciçamente paralela da plataforma JoiN e que um ganho de tempo significativo em relação ao processamento seqüencial pode ser obtido quando é feita uma escolha adequada dos parâmetros de distribuição de carga de trabalho.

Processamento paralelo - Protein data bank - Java