

T789

USO DE UMA PLATAFORMA DE PROCESSAMENTO MACIÇAMENTE PARALELO NO ESTUDO DE ARRANJOS ATÔMICOS E MAPEAMENTOS MOLECULARES

Ramon Gomes Brandão (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Marco Aurélio Amaral Henriques (Orientador), Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação - FEEC, UNICAMP

O estudo quantitativo de arranjos atômicos em proteínas requer uma grande quantidade de cálculos. Quanto maior o número de átomos presentes, maior é o tempo de processamento necessário para extrair informações tais como área e volume de uma molécula. Sistemas de processamento de grande porte normalmente são mais indicados para tais tarefas, mas podem ter um custo proibitivo. Neste trabalho é estudada a viabilidade de se usar a plataforma virtual de processamento maciçamente paralelo JoiN para a execução de algoritmos de cálculo de área e volume de proteínas mapeadas no *Protein Data Bank* (PDB). Esta execução é realizada de forma distribuída em um ambiente heterogêneo de baixo custo, aproveitando o tempo ocioso de computadores acessíveis via rede. Foram desenvolvidos programas em Java para processar de forma paralela os dados de cada molécula extraída do PDB. O espaço tridimensional ocupado pela molécula é dividido em cubos contendo um número variado de átomos e cada cubo é processado em um computador distinto. Os resultados mostram que, para uma diminuição significativa no tempo de processamento, é necessário aumentar o número de computadores e maximizar em cada um a razão entre os tempos de computação e de comunicação de dados.

Processamento Paralelo - Protein Data Bank- Java