

Ottimizzazione e parallelizzazione di un codice per il calcolo del coefficiente preferenziale nello studio di osmoprotettori

Fabio Gabas, Dipartimento SCAI, CINECA



PREFerential Coefficients calculation code **PAR**allelization



Responsabile della ricerca: Maurizio Sironi (Professore Associato)

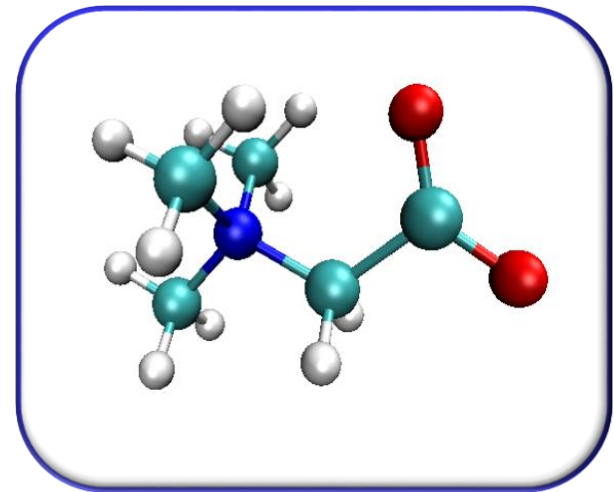
Team CINECA: Fabio Gabas, Maurizio Cremonesi

Personale esterno coinvolto: Stefano Pieraccini (Ricercatore), Riccardo De Gonda (Dottorando)

Per permettere a piante e animali di sopravvivere in condizioni ambientali estreme la natura ha sviluppato diverse strategie



Una di queste consiste nell'accumulo nel fluido cellulare di piccoli cosolventi chiamati osmoprotettori



AGRICOLTURA

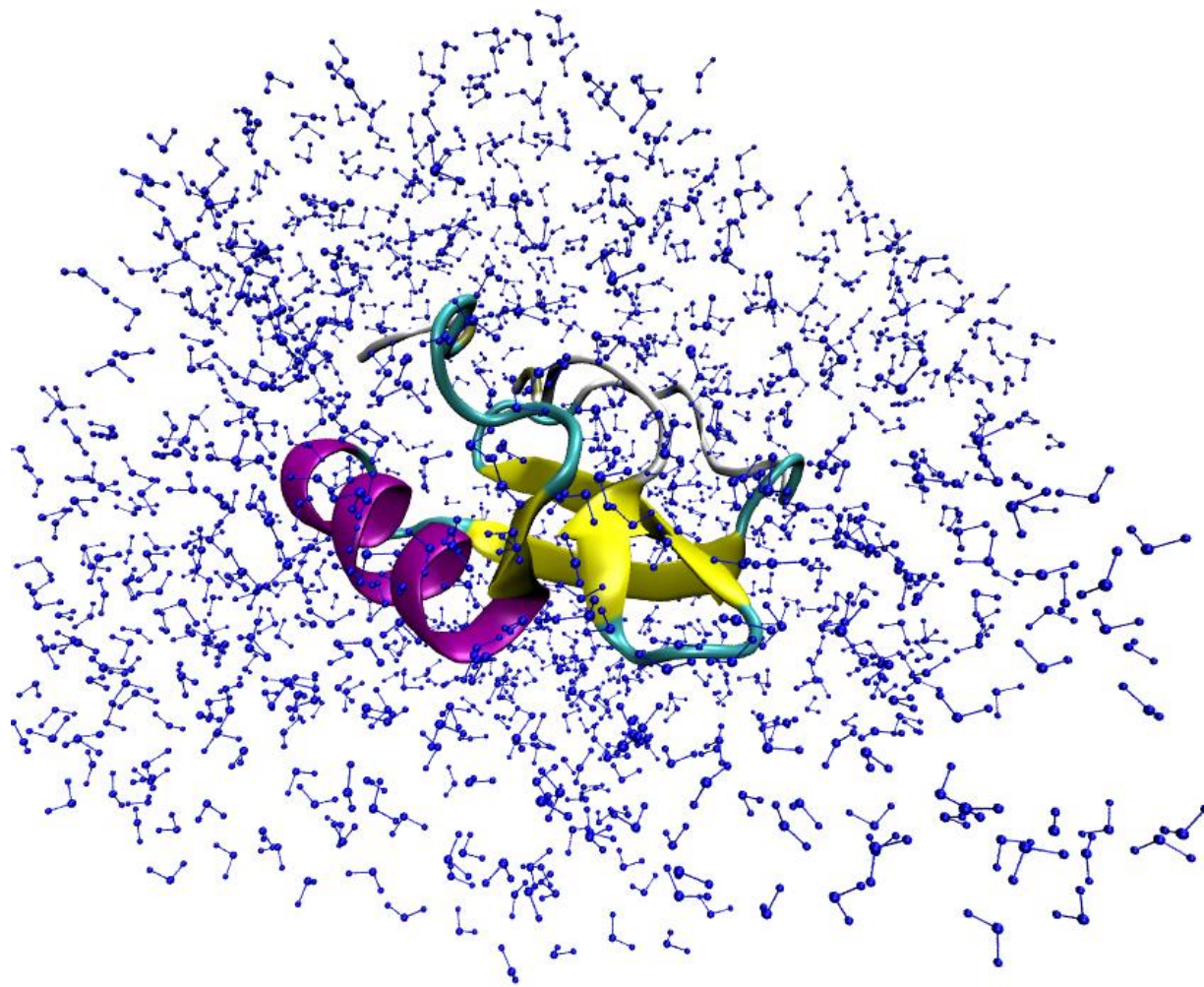


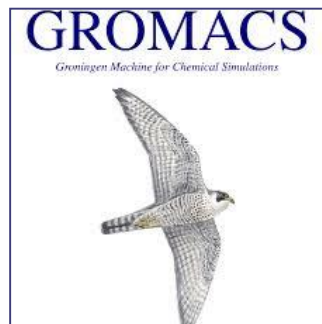
OFTALMOLOGIA



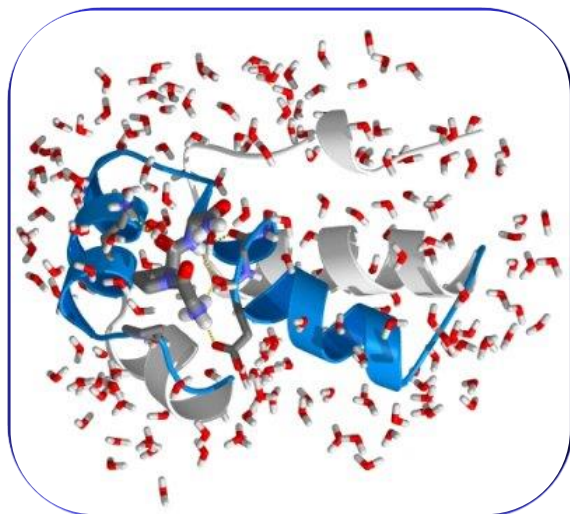
AGRONOMIA







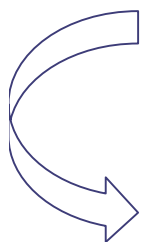
Codice di
post-
processing



Coefficiente
Preferenziale



gprof



Codice sequenziale

Analisi e Ottimizzazione

Parallelizzazione



Codice parallelo



Analisi e Ottimizzazione

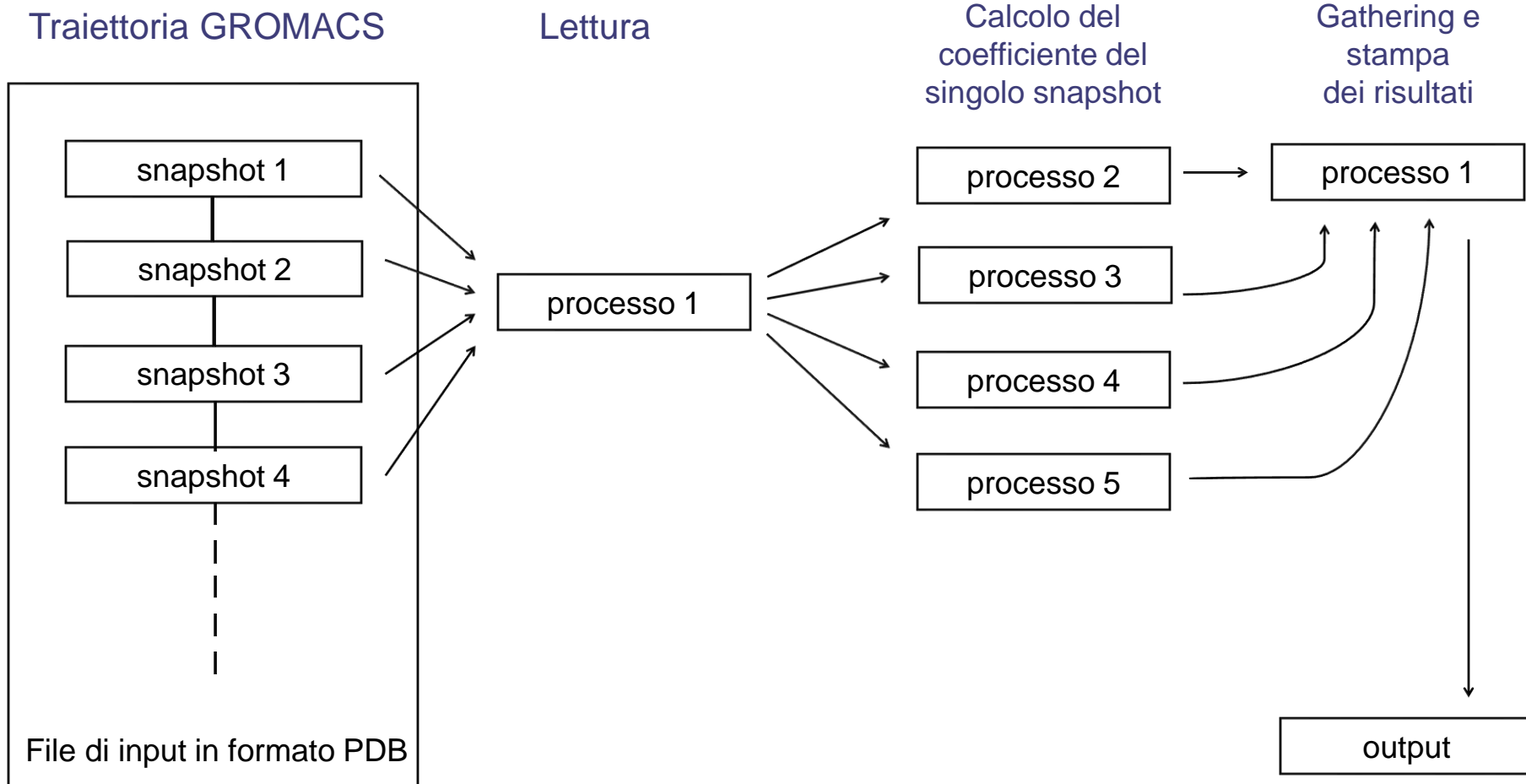
```
graph TD; A[Analisi e Ottimizzazione] --> B[Analisi del codice sequenziale con GPROF]; A --> C[Modifica dei parametri di input]; B --> D[Riduzione e ottimizzazione dell'I/O]; C --> D;
```

Analisi del
codice
sequenziale
con GPROF

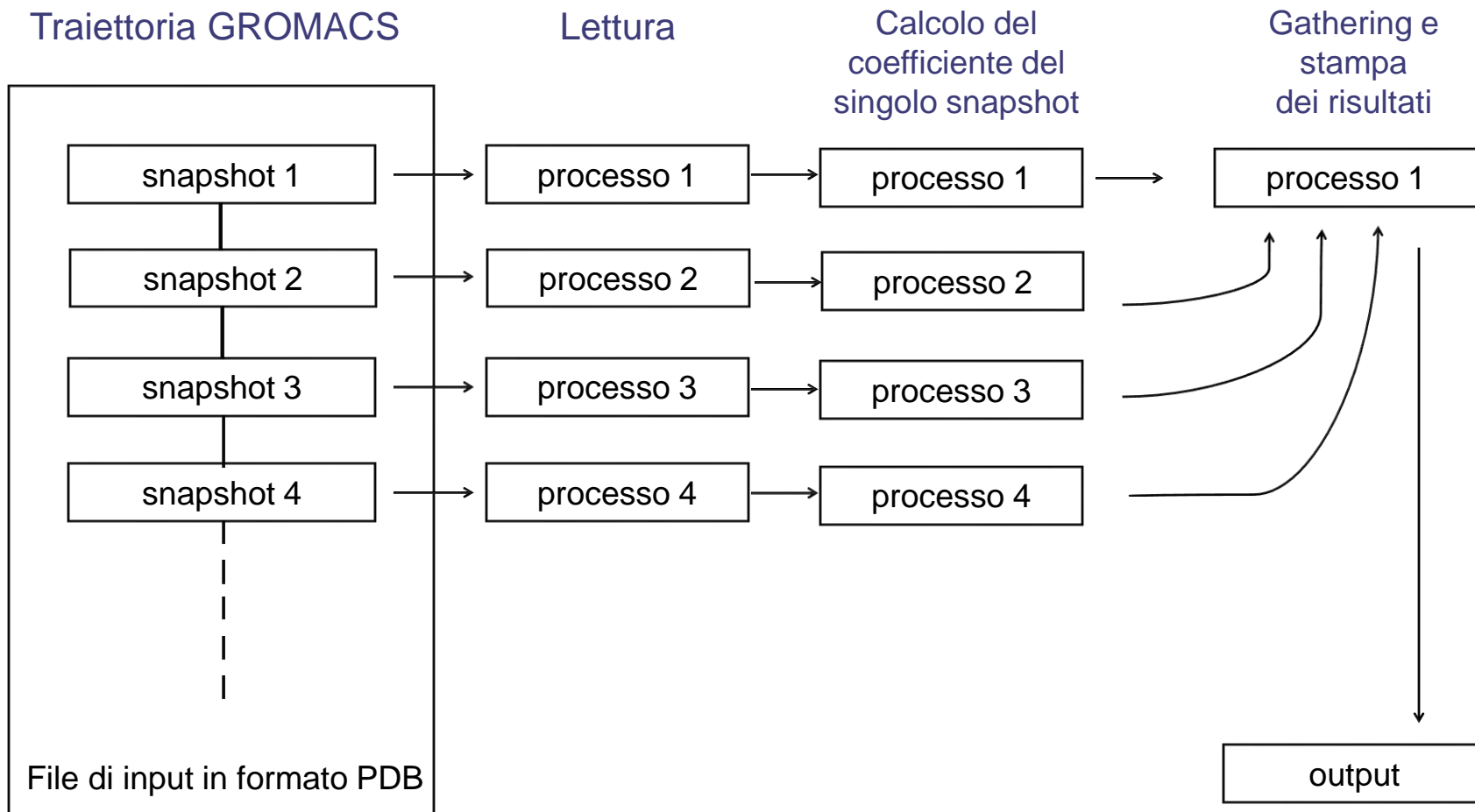
Modifica dei
parametri di
input

Riduzione e
ottimizzazione
dell'I/O

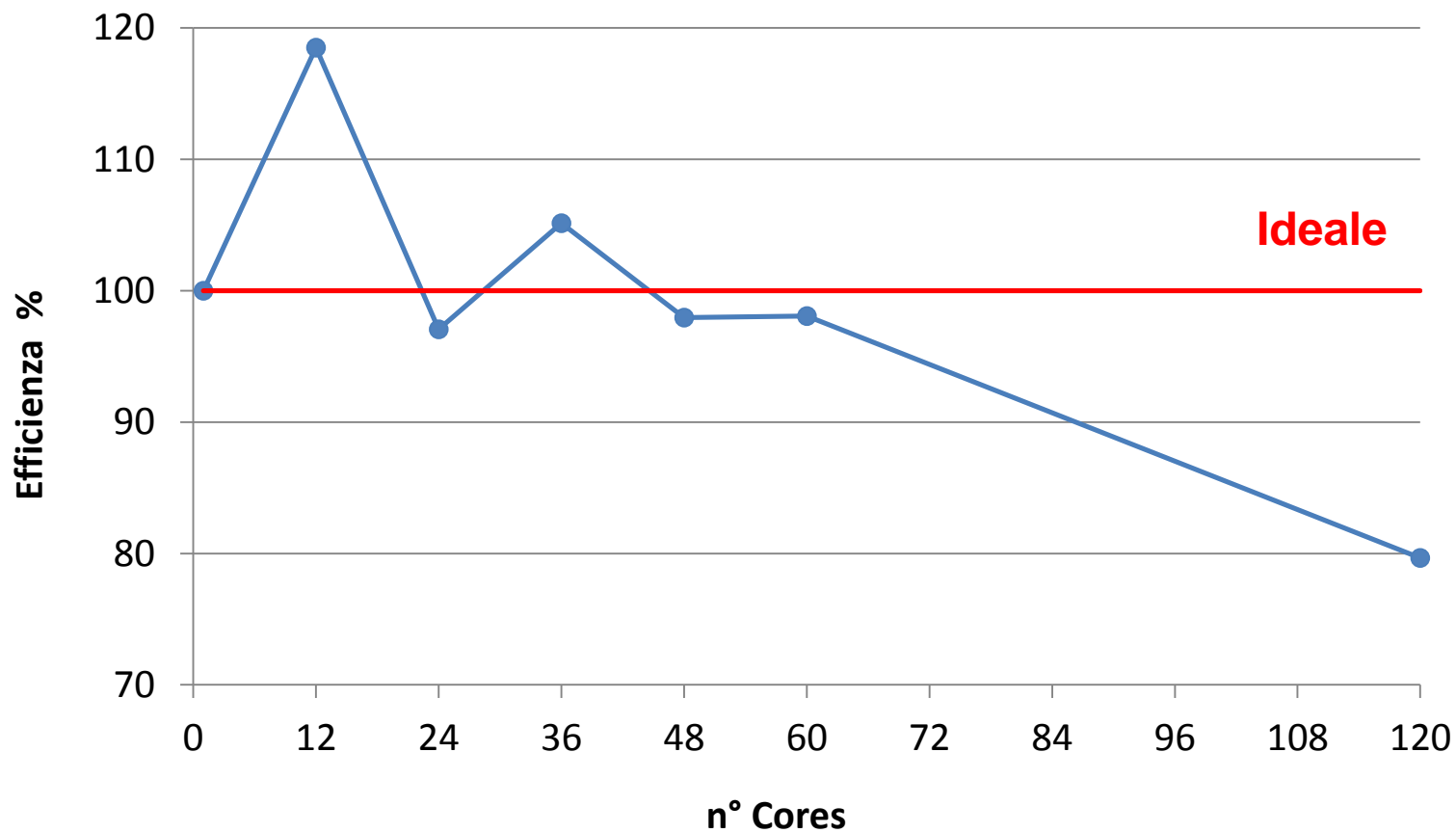
Parallelizzazione



Parallelizzazione



Codice parallelo



- **Analizzare simulazioni di dinamica molecolare campionando la traiettoria con una frequenza più alta**
- **Studiare sistemi contenenti un numero di atomi maggiore**
- **Utilizzare piattaforme HPC sia per il calcolo delle traiettorie sia per lo step successivo di post-processing**
- **Fornire alla comunità scientifica un codice parallelo ed efficiente per il calcolo del coefficiente preferenziale**

Grazie per la cortese attenzione!

Fabio Gabas

CINECA - SuperComputing Applications and Innovation Department

f.gabas@ Cineca.it