

Kémiai szoftverek fejlesztése újrakonfigurálható számítógépeken Kémiai adatbázis műveletek

A technológiáról

Az újrakonfigurálható számítógépek programozható logikai egységeket (FPGA-kat) tartalmaznak, amelyek párhuzamosításra alkalmas algoritmusokat akár ezerszer nagyobb hatékonysággal oldanak meg, mint a hagyományos processzorok. Legújabban már Intel és AMD processzor foglalatba behelyezhető FPGA modulok kaphatók, ami elterjedésüket elősegíti. A projekt célja, hogy ebben a technológiában rejlő lehetőségeket kiaknázza és hasznos alkalmazásokat hozzon létre gyógyszeripari kutatók számára. A projekt egyik külső együttműködő partnere, a Chemistry Logic Kft. a világon vezető ezen technológia kémiai alkalmazásában. További információ www.chemistrylogic.com.

A témáról

A kémiai szerkezeti adatbázisok ellentétben a szokásos adatbázisokkal, nem indexálhatók, ezért ezek kezelése gyakran számítási kapacitási korlátokba ütközik. Ma már léteznek olyan, több milliárd molekulát tartalmazó adatbázisok, amelyekben a keresési műveletek kényelmetlenül lassúak. A keresési műveleteken kívül számítási kihívást jelent nagy adatbázisok esetén az adatok osztályozása hierarchikus és nem-hierarchikus módszerekkel. A projekt célja új módszerek fejlesztése, amely kémiaiag hasonló molekulák keresését és nagy adatbázisok osztályozását lehetővé teszik.

Együttműködő partnerek

Ez a PhD projekt téma szorosan kapcsolódik Chemistry Logic Kft, evopro Kft és Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi Egyetemmel közös kutatás-fejlesztési projektjéhez. A sikeres jelöltnek rész munkaidős álláslehetőséget vagy ösztöndíjat biztosítunk.

További információ: Bérces Attila, +36 70 5748001 vagy attila.berces@chemistrylogic.com.

Kémiai szoftverek fejlesztése újrakonfigurálható számítógépeken Fehérjék és gyógyszermolekulák kölcsönhatásának számítása

A technológiáról

Az újrakonfigurálható számítógépek programozható logikai egységeket (FPGA-kat) tartalmaznak, amelyek párhuzamosításra alkalmas algoritmusokat akár ezerszer nagyobb hatékonysággal oldanak meg, mint a hagyományos processzorok. Legújabbán már Intel és AMD processzor foglalatba behelyezhető FPGA modulok kaphatók, ami elterjedésüket elősegíti. A projekt célja, hogy ebben a technológiában rejlő lehetőségeket kiaknázza és hasznos alkalmazásokat hozzon létre gyógyszeripari kutatók számára. A projekt egyik külső együttműködő partnere, a Chemistry Logic Kft. a világon vezető ezen technológia kémiai alkalmazásában. További információ www.chemistrylogic.com.

A témáról

A gyógyszerfejlesztés egyik kulcs lépése, hogy olyan szerkezetű molekulákat (vegyületeket) keresünk, amely egy adott célfehérjéhez fizikailag jól kötődik és ezáltal annak működését befolyásolni tudja. A kémiai szerkezetek számítógépes szétválogatása aszerint, hogy kedvező kölcsönhatás kialakul-e az adott molekula és a fehérje között meggyorsítja a gyógyszerkutatást azáltal, hogy azon vegyületekre, melyekről számítógéppel eldöntjük, hogy alkalmatlanok, már eleve nem kell a kísérleteket elvégezni. Ezt a számítógépes folyamatot hívják virtuális szerkezet alapú szűrésnek. Ez a projekt leginkább fizika iránt érdeklődők figyelmét keltheti fel, hiszen a kölcsönhatás számításánál molekuláris erők és a termodinamika figyelembe vétele szükséges. Ugyanakkor a projekt mély fizikai előismereteket nem igényel. Fontos viszont, hogy a kutatás-fejlesztés egy multi-diszciplináris együttműködés keretében történik.

Együttműködő partnerek

Ez a PhD projekt téma szorosan kapcsolódik Chemistry Logic Kft, evopro Kft és Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi Egyetemmel közös kutatás-fejlesztési projektjéhez. A sikeres jelöltnek rész munkaidős álláslehetőséget vagy ösztöndíjat biztosítunk.

További információ: Bérces Attila, +36 70 5748001 vagy attila.berces@chemistrylogic.com.

Képfeldolgozási szoftverek fejlesztése újrakonfigurálható számítógépeken

A technológiáról

Az újrakonfigurálható számítógépek programozható logikai egységeket (FPGA-kat) tartalmaznak, amelyek párhuzamosításra alkalmas algoritmusokat akár ezerszer nagyobb hatékonysággal oldanak meg, mint a hagyományos processzorok. Legújabbán már Intel és AMD processzor foglalatba behelyezhető FPGA modulok kaphatók, ami elterjedésüket elősegíti. A projekt célja, hogy ebben a technológiában rejlő lehetőségeket kiaknázza és hasznos alkalmazásokat hozzon létre gyógyszeripari kutatók számára. A projekt egyik külső együttműködő partnere, a Chemistry Logic Kft. a világon vezető ezen technológia kémiai alkalmazásában. További információ www.chemistrylogic.com.

A témáról

Ez a projekt konkrét gyógyszerkutatásban alkalmazott képfeldolgozási algoritmusoknak a mikrogranuláris párhuzamosításával történő felgyorsításával foglalkozik. A mikroszkóp alatt levő sejtek vagy neuronok számításától a textúra felismerésig több olyan feladat van, amely a nagytvitelű kísérletekben komoly számítási kihívást jelent. Ezen műveletek egy része alkalmas arra, hogy újrakonfigurálható rendszereken lényegesen hatékonyabban végezzük őket. A kutatás célja, hogy gyógyszerkutatásban általánosan használatos képfeldolgozó algoritmusokat sokkal hatékonyabban oldjon meg újrakonfigurálható számítógépen.

Együttműködő partnerek

Ez a PhD projekt téma szorosan kapcsolódik Chemistry Logic Kft, evopro Kft és Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi Egyetemmel közös kutatás-fejlesztési projektjéhez. A sikeres jelöltnek részmunkaidős álláslehetőséget vagy ösztöndíjat biztosítunk.

További információ: Bérces Attila, +36 70 5748001 vagy attila.berces@chemistrylogic.com.

Nagy teljesítményű bioinformatikai algoritmusok fejlesztése újrakonfigurálható számítógépeken

A technológiáról

Az újrakonfigurálható számítógépek programozható logikai egységeket (FPGA-kat) tartalmaznak, amelyek párhuzamosításra alkalmas algoritmusokat akár ezerszer nagyobb hatékonysággal oldanak meg, mint a hagyományos processzorok. Legújabban már Intel és AMD processzor foglalatba behelyezhető FPGA modulok kaphatók, ami elterjedésüket elősegíti. A projekt célja, hogy ebben a technológiában rejlő lehetőségeket kiaknázza és hasznos alkalmazásokat hozzon létre gyógyszeripari kutatók számára. A projekt egyik külső együttműködő partnere, a Chemistry Logic Kft. a világon vezető ezen technológia kémiai alkalmazásában. További információ www.chemistrylogic.com.

A témáról

A génom szekvenálási technológia fejlesztése lehetővé teszi, hogy a 2008-as év végére 1000 dollár költségen egy ember génszekvenciáját meghatározzuk. Nyolc évvel ezelőtt, egyetlen emberi génom szekvenálása több tucat intézmény nemzetközi összefogását, illetve több százmillió dollár befektetést igényelt. Ez a fejlődés azonban olyan mennyiségű adatot fog eredményezni, amelynek a számítógépes feldolgozása felülmúl minden létező kapacitást. Az újrakonfigurálható számítógépeket már tizenöt éve sikerrel használják génszekvenciák összehasonlítására, de ennek ellenére rengeteg a megoldatlan kérdés és még mindig vannak új lehetőségek világszinten vezető módszerek kifejlesztésére. Ennek a projektnek a célja újrakonfigurálható számítógépes módszerek kidolgozása, amely a génszekvencia alapú diagnosztikában alkalmazhatók.

Együttműködő partnerek

Ez a PhD projekt téma szorosan kapcsolódik Chemistry Logic Kft, evopro Kft és Budapesti Műszaki és Közgazdaságtudományi Egyetemmel közös kutatás-fejlesztési projektjéhez. A sikeres jelöltnek részmunkaidős álláslehetőséget vagy ösztöndíjat biztosítunk.

További információ: Bérces Attila, +36 70 5748001 vagy attila.berces@chemistrylogic.com.