

Magányos töltött alfa-hélixeket megbízhatóan detektáló rendszer kialakítása FPGA felhasználásával

Kovács Ákos

November 20, 2016

Konzulens: Dr. Gáspári Zoltán, Dr. Nagy Zoltán

Minden sejtekben lezajló folyamatokban fehérjék vesznek részt, fontosságuk az élet területén vitathatatlan. A fehérjék pontos szerkezete napjainkban még nem kiszámítható, a kísérletekkel történő megfejtése is nehézkes.

Különbéle speciális struktúrák felismerésére azonban számos detektáló algoritmus született. Ezen algoritmusok közül az egyik legújabb algoritmussal foglalkoztam, mely a magányos töltött alfa-hélix szerkezet kimutatására alkalmas. Az FT_CHARGE algoritmus futtatásához csak a vizsgálandó fehérje aminosavszekvenciájára van szükség, mely online adatbázisokból elérhető. A jósló algoritmus helyessége kísérletekben bizonyítva lett, a probléma az algoritmus futási sebessége volt. A teljes Uniprot adatbázison történő lefuttatás időszükséglete egy mai CPU-n 3 év.

TDK dolgozatom témája az algoritmus felgyorsítása. Elkészítettem egy C++ implementációt illetve egy FPGA-s megvalósítást is. Az előbbi egy nagyságrendes gyorsulást hozott, míg az utóbbival a teljes adatbázison történő lefuttatás mindössze 15 órát vesz igénybe. Felhasznált rendszer egy Zed-Board Zynq-7000 ARM/FPGA SoC Development Board volt, mely 2 ARM processzormagot, 512MB DDR3 memóriát, és egy kisméretű, energiatakarékosságra kihegyezett FPGA részt tartalmaz.

A rendszer önállóan is működik. Ebben az esetben először az ARM rendszeren futó PetaLinux letölti az adatbázist az internetről, előfeldolgozza az adatokat, kihelyezi az adatokat FPGA-ra az algoritmus kiszámításának céljából, majd a kapott eredmények dokumentálását végzi el. A végső gyakorlatban használt üzemmód esetén az elő és utófeldolgozást az ARM modul helyett egy különálló PC végzi el. A kommunikáció gigabites Ethernet kapcsolaton megy végbe a számítógép és az FPGA-s rendszer között. Az Uniprot adatbázis átvizsgálása havi rendszerességgel fog történni az egyetemen, a kapott eredményekből pedig adatbázis lesz fenntartva. A szekvenciánkénti keresés továbbra is elérhető marad a csahserver.itk.ppke.hu weboldalon.