

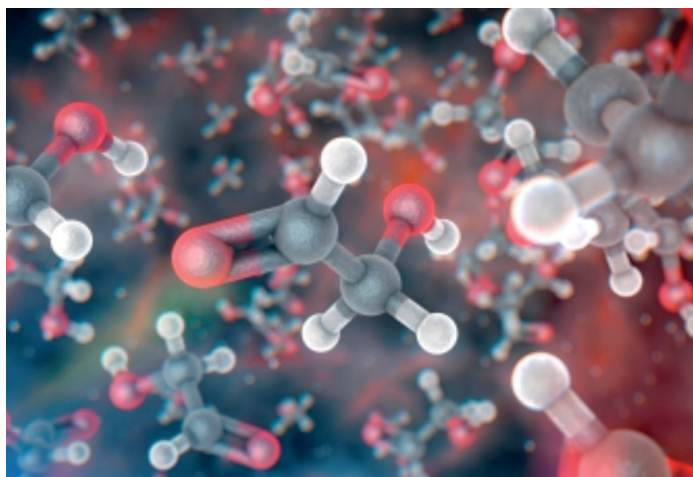


KVANTUMKÉMIÁBAN KUTATNAK A MAGYAROK

Nagysebességű kvantumkémiai számítások gyorsításán dolgozott a FETI Kft. és a Pázmány Egyetem kutatócsoportja. A kvantumkémia ipari alkalmazása a 2000-es években kezdődött el, s azóta számos, az adott iparágban meghatározó vállalat folytat kvantumkémiai szimulációt (például BASF, Samsung, Toyota Motors). A kvantumkémia módszereit számos gyógyszergyár is alkalmazza gyógyszer-molekulák kifejlesztésére a nehéz és költséges kísérletek helyett.

A kvantumkémiai módszerek szoftver és hardver igénye azonban óriási és ez a módszerek elterjedésének legnagyobb akadálya. A számítástechnika legújabb trendje szerint a számításigényes feladatokat sokprocesszoros grafikus feldolgozóegységekkel (Graphics Processing Unit – GPU) igyekeznek megoldani. Ez a folyamat speciális programozási modellek alkalmazását jelenti.

Jelen projekt célja a kvantumkémiai programok leginkább időigényes részének, az integrálszámításnak GPU alapú megoldása volt. A kutatók több GPU-val felszerelt számítógépet összekapcsolva csökkentették a számítási időt és a költségeket. Így a jelenleg vizsgált molekuláknál jelentősen több atomot tartalmazó molekulákon lehet kvantumkémiai számításokat végezni, amire mind az iparban, mind a kutatásban igen nagy igény van. Hosszú távon a projekt elősegítheti olyan nagy horderejű problémák megoldását is (a teljesség igénye nélkül), mint a hatékony gyógyszermolekulák kifejlesztése, fehérje és gyógyszermolekula kapcsolódásának szimulációja, hatékonyabb napelemek létrehozása és a molekuláris bionika eddig megoldatlan problémáinak megoldása.



A PPKE-ITK és a FETI Kft. az említett szoftverrendszer kifejlesztését a „Piacorientált kutatás-fejlesztési tevékenység támogatása a közép-magyarországi régióban” című pályázat keretében a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési És Innovációs Alapból (Pályázati azonosító: Kvantumkémiai számítások jelentős gyorsítása GPU alapú párhuzamos, Gauss-bázis sal működőintegrál modul kifejlesztésével KMR_12-1-2012-0202) valósította meg.