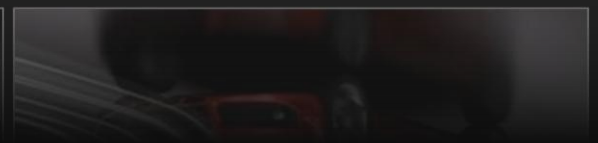
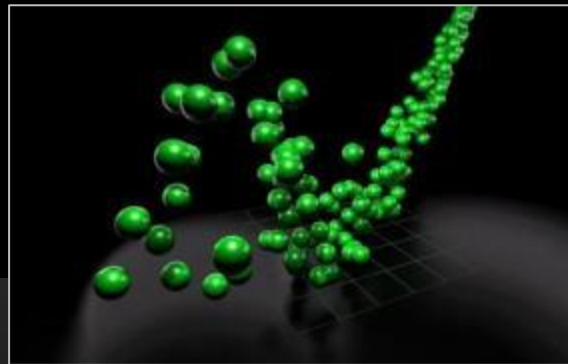
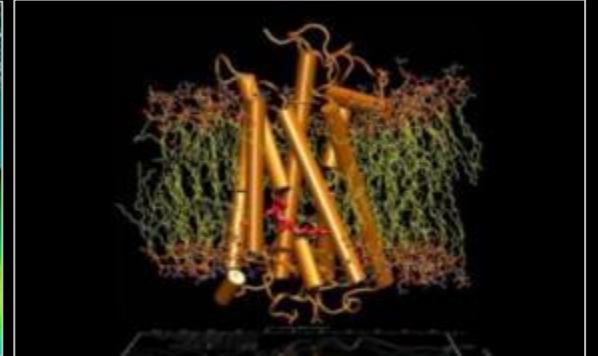
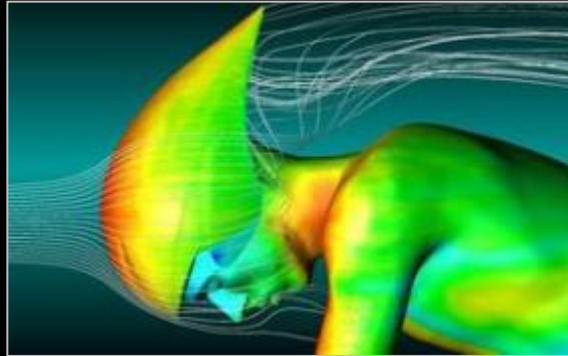


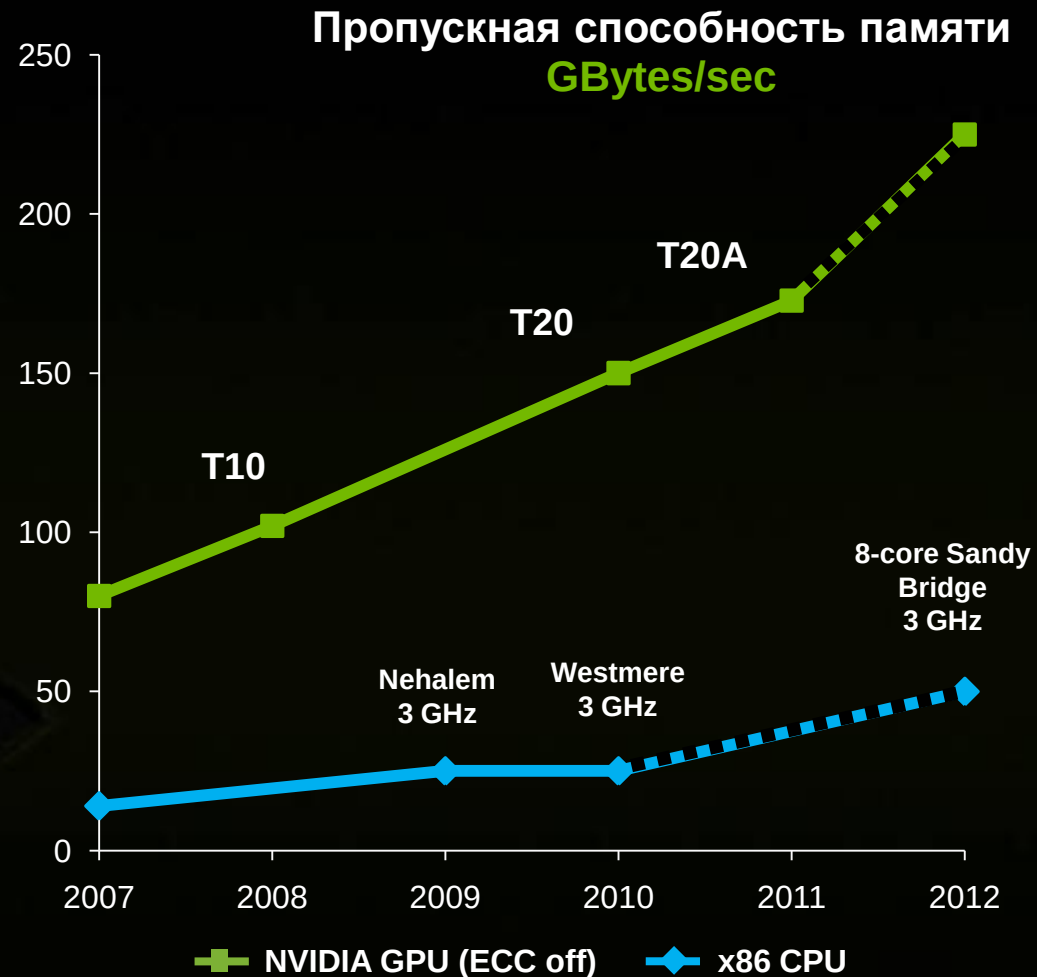
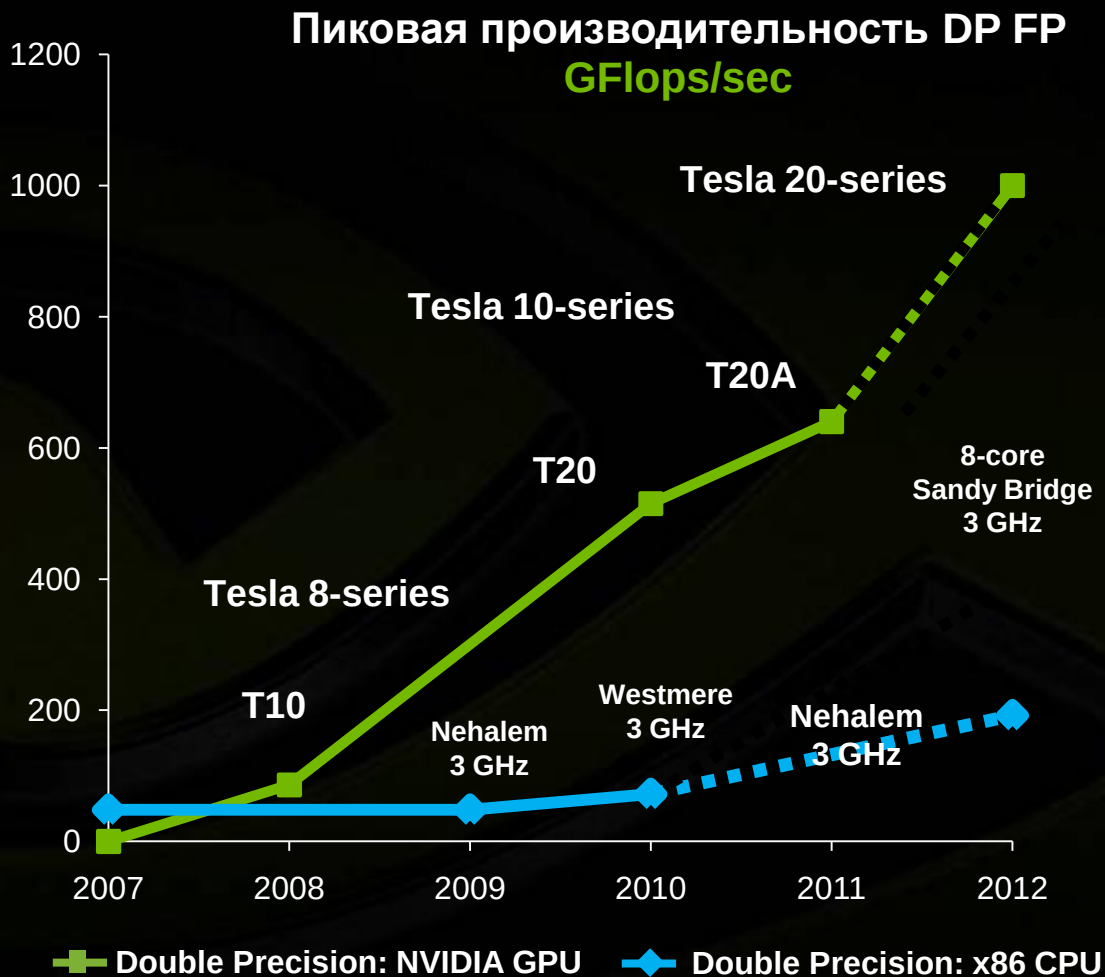
Решения NVIDIA Tesla для задач био- и молекулярной динамики

Дмитрий Конягин, NVIDIA

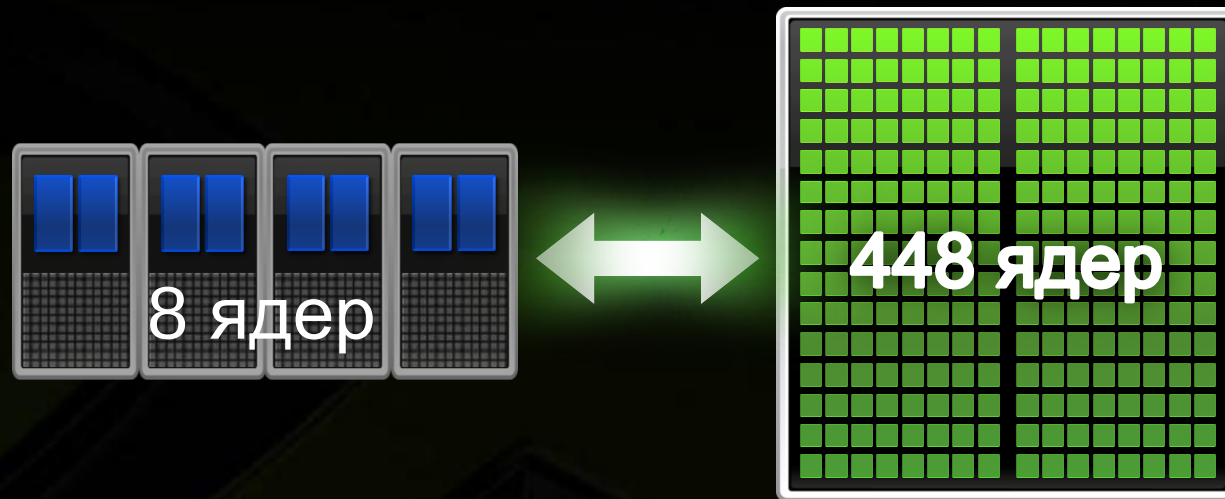




Обзор развития архитектур



Вычисления на GPU



CPU + GPU

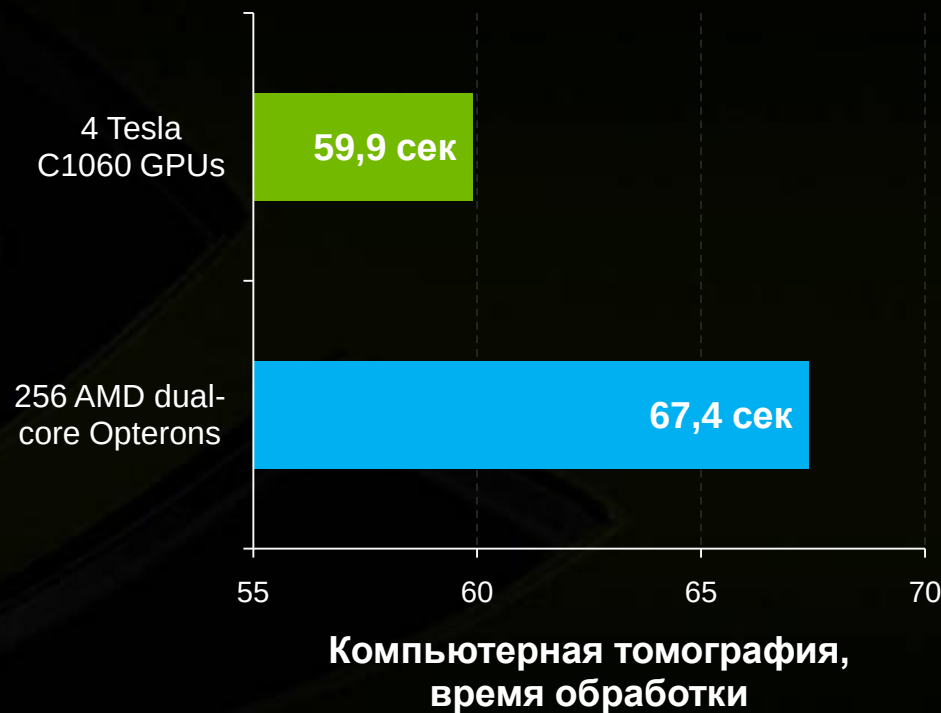
Гибридная архитектура

GPU : переломный момент в отрасли суперкомпьютеров

Десктоп эффективнее кластера



CalcUA
\$5 млн.



**Tesla Personal
Supercomputer**
\$10,000

Источник: University of Antwerp, Belgium

Вычисления на GPU для различных целей



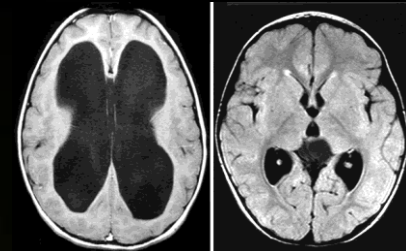
Разработка лекарств
Молекулярная Динамика



Разведка нефти и газа
Обработка сейсмических данных



Проектирование
Гидро- газодинамика



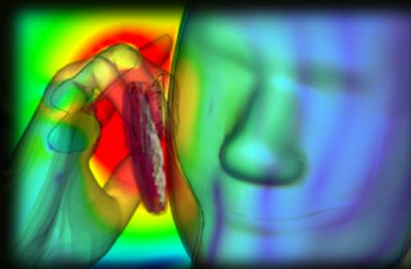
Медицинская визуализация
КТ и МРТ



Астрофизика
Происхождение вселенной



Финансы
Биржевая торговля



Разработка РЭА
Проектирование антенн



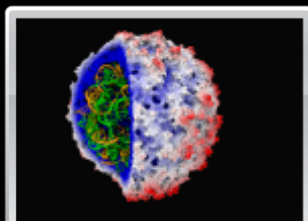
Прогнозирование погоды
Физика атмосферы

Прирост производительности до 150 раз



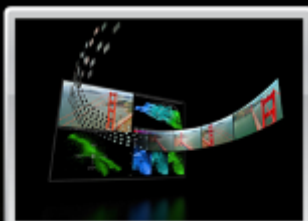
146X

Рентгенография,
томография
U of Utah



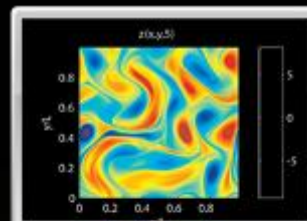
36X

Молекулярная
динамика
U of Illinois, Urbana



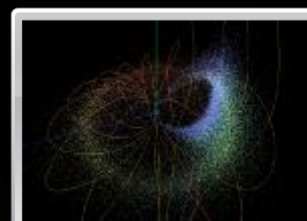
18X

Транскодирование
видео
Elemental Tech



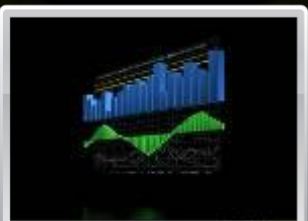
50X

Математические
вычисления
AccelerEyes



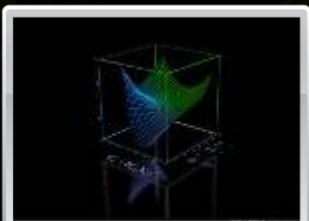
100X

Астрофизика
RIKEN



149X

Финансовые
задачи
Oxford



47X

Линейная
алгебра
Universidad Jaime



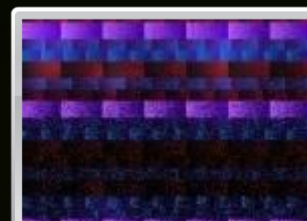
20X

3D ультразвук
Techniscan



130X

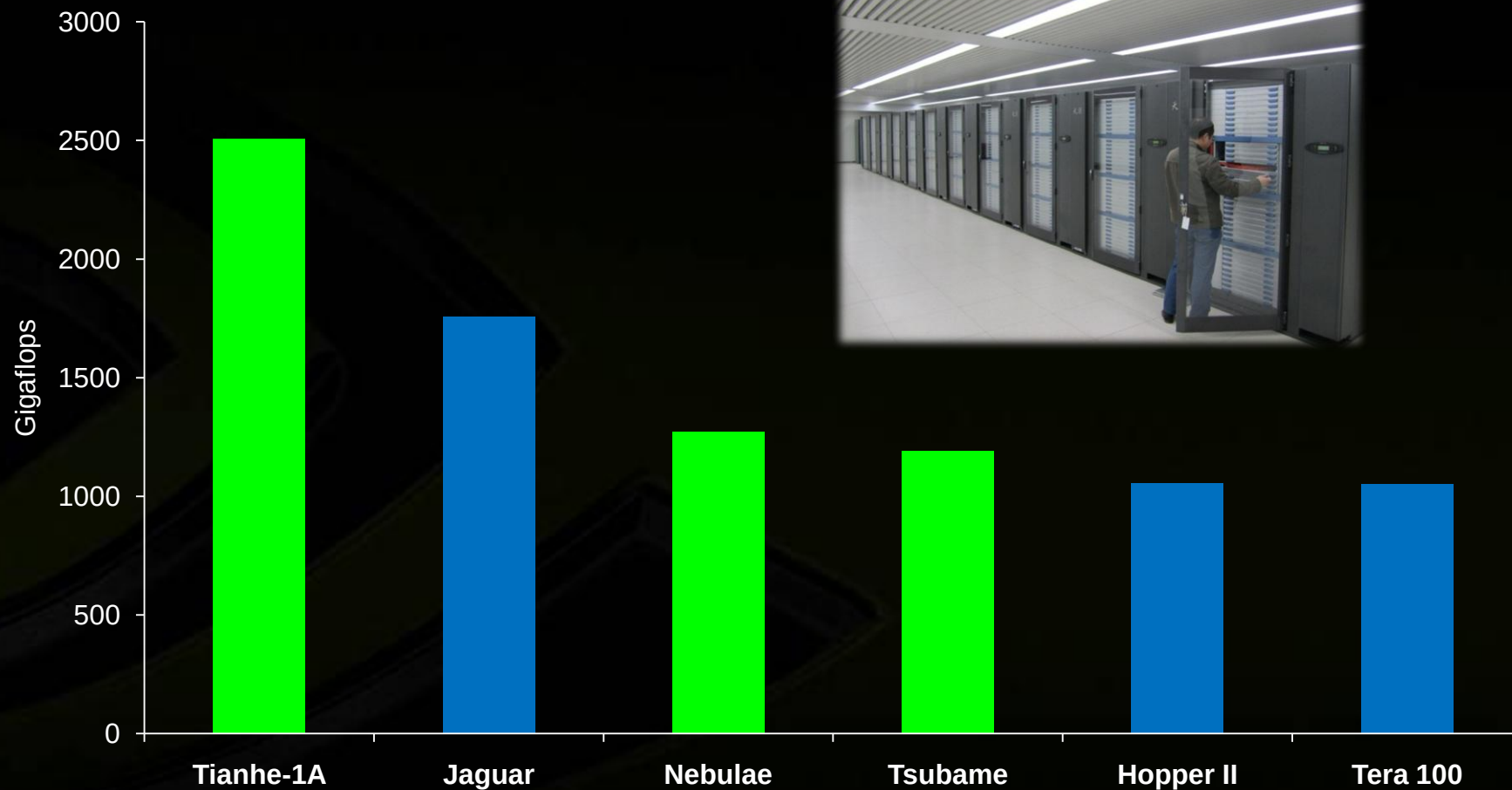
Квантовая химия
U of Illinois, Urbana



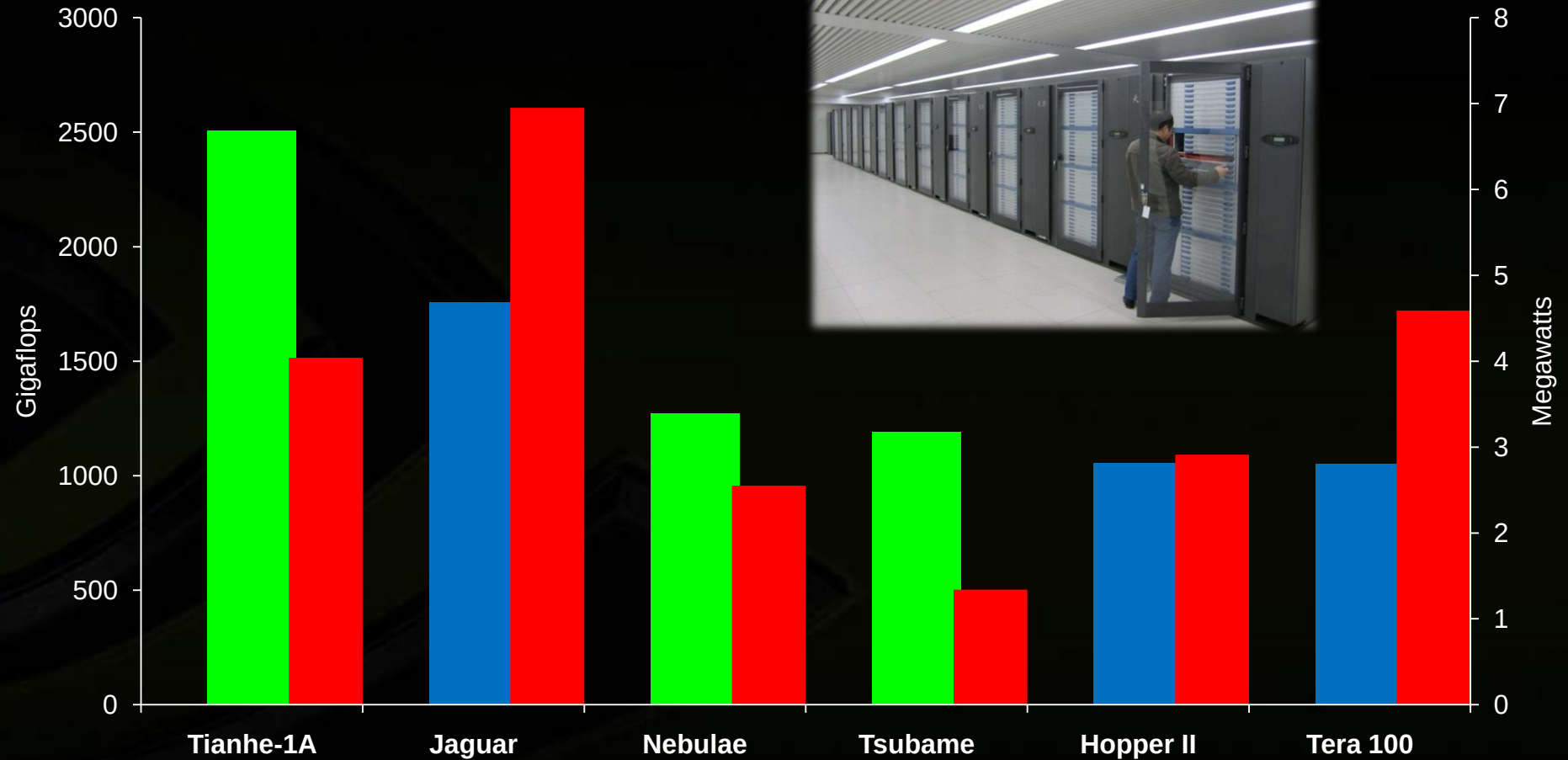
30X

Генная
инженерия
U of Maryland

3 из Топ 5 суперкомпьютеров

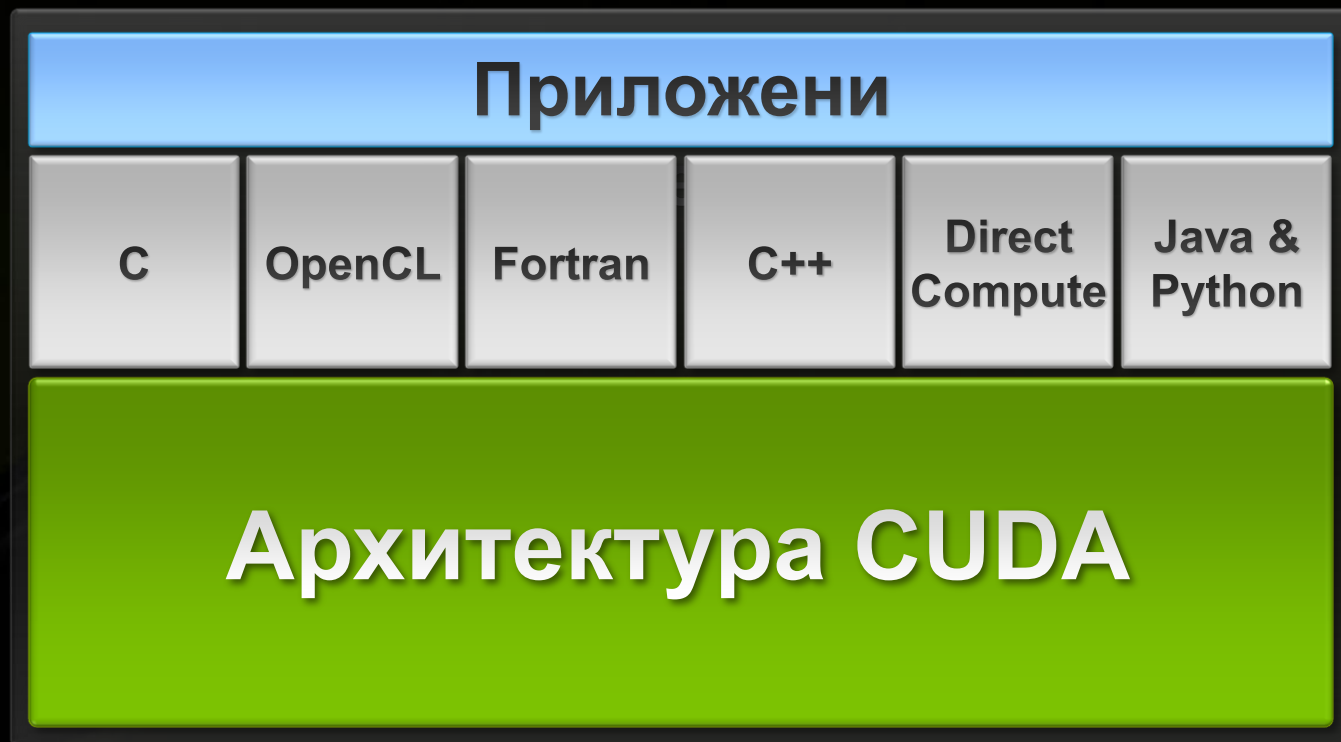


3 из Топ 5 суперкомпьютеров



Архитектура CUDA

- Среда разработки
- Документация, сотни примеров
- Компилятор Си, Фортран (PGI)
- Поддержка OpenCL и DirectCompute
- Библиотеки
 - FFT
 - BLAS
 - LAPACK
 - Image processing
 - Video processing
 - Signal processing
 - Vision



Универсальность архитектуры

200+ млн. GPU поддерживающих CUDA по всему миру

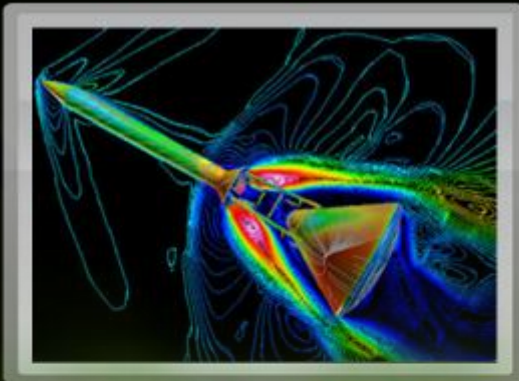
GeForce®

Развлечения



Tesla™

Высокопроизводительные вычисления



Quadro®

Конструирование и дизайн



GPU

Персональный суперкомпьютер Tesla



Производительность

- Массивно параллельная CUDA архитектура
- 1792 ядра. 4 Терафлоп/с
- В 250 раз мощнее ПК

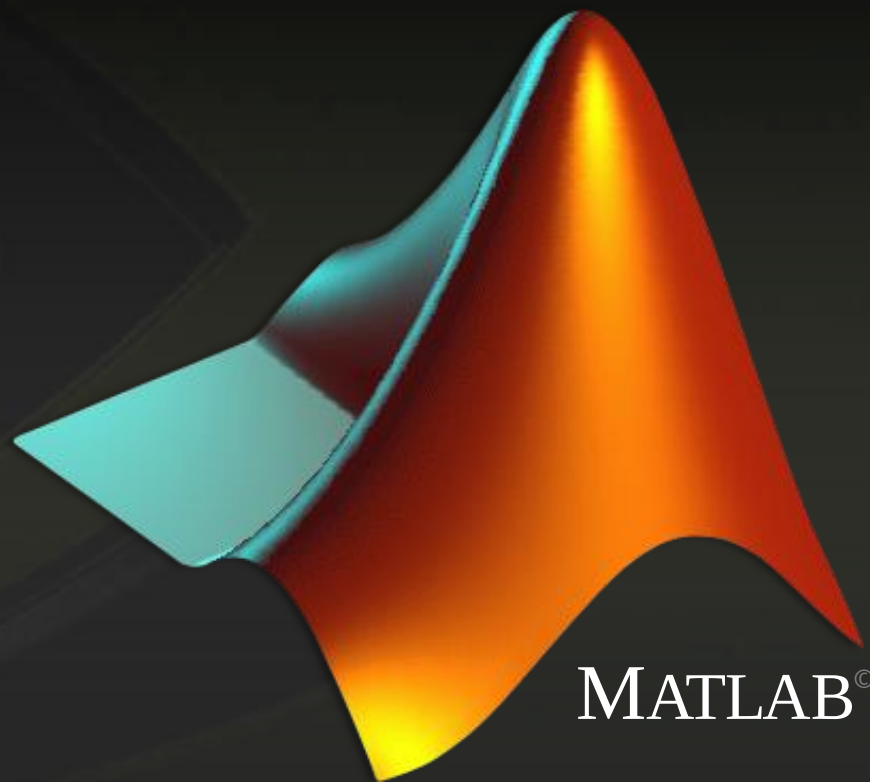
Удобство

- Суперкомпьютер на рабочем столе
- Включается в обычную розетку

Доступность

- Программируется на Си под Windows и Linux
- Стоимость порядка \$10,000

Ускоряемый на CUDA инструментарий для параллельных вычислений

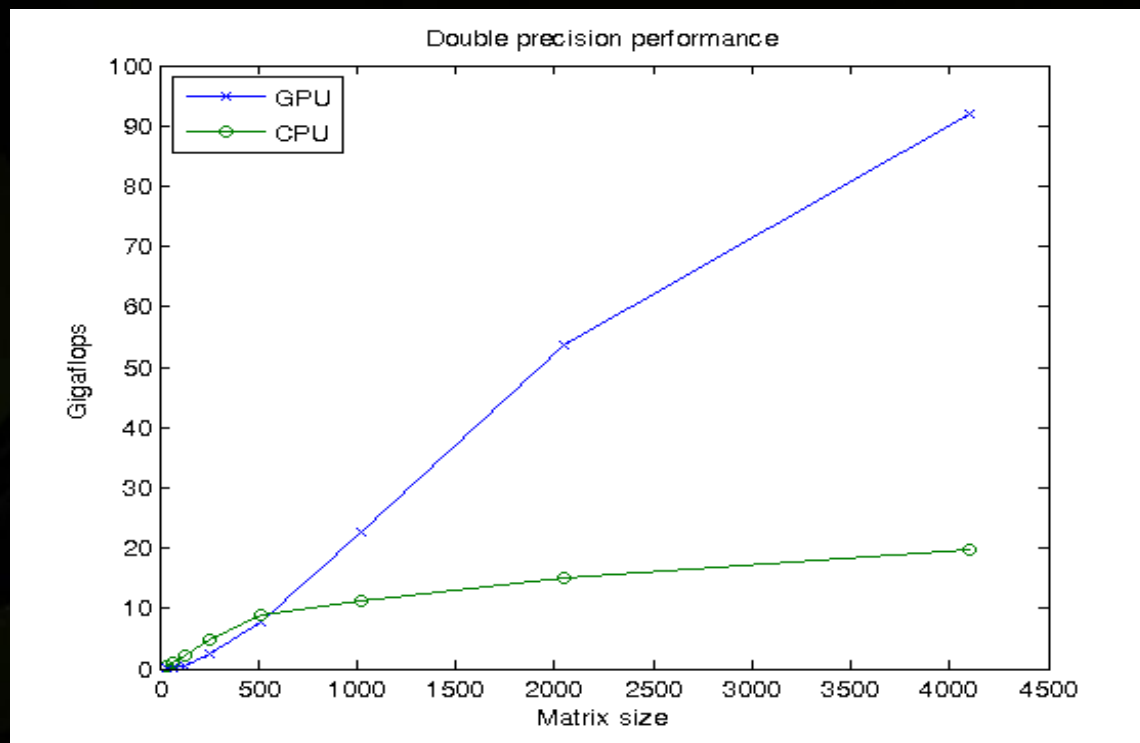


MATLAB®

Производительность MATLAB на Tesla

Relative Performance, MATLAB® mldivide

Matrix left division ($A \setminus b$), Tesla C2050 vs. Core 2 Quad Q6600



http://www.mathworks.com/products/parallel-computing/demos.html?file=/products/demos/shipping/distcomp/paralleldemo_gpu_backslash.html

Tesla Bio WorkBench: био- химия & био- информатика

Applications

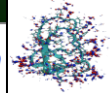
Molecular Dynamics & Quantum Chemistry

Amber 11



GROMACS FAST. FLEXIBLE. FREE.

TeraChem



NAMD



LAMMPS

acemD

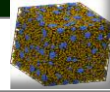


VMD



GAMESS

HOOTMD blue



Bio-Informatics

HMMER

Scalable Informatics
University at Buffalo
The State University of New York

Hex (Docking)

CUDA-BLASTP

CUDASW++

MUMmerGPU

CUDA-EC

Community

Download,
Documentation

Technical
papers

Discussion
Forums

Benchmarks
& Configurations

Platforms

Tesla Personal Supercomputer



Tesla GPU Clusters



AMBER: Assisted Model Building with Energy Refinement

Released
Now!



- Explicit & Implicit Solvent
- All ensembles (NVE, NVT, NPT)

Q3 2010



- Multi-GPU + MPI support
- Patch to AMBER 11

Accuracy

- Must pass AMBER regression tests
- Energy conservation must be comparable to DP CPU results

Performance

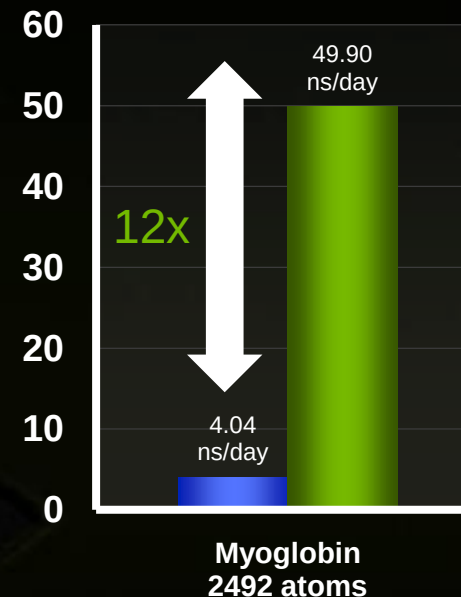
- Implicit Solvent (GB) 65-120x single core
- Explicit Solvent (PME) 27 cores

More Info

http://www.nvidia.com/object/amber_on_tesla.html

Implicit (GB) Solvent

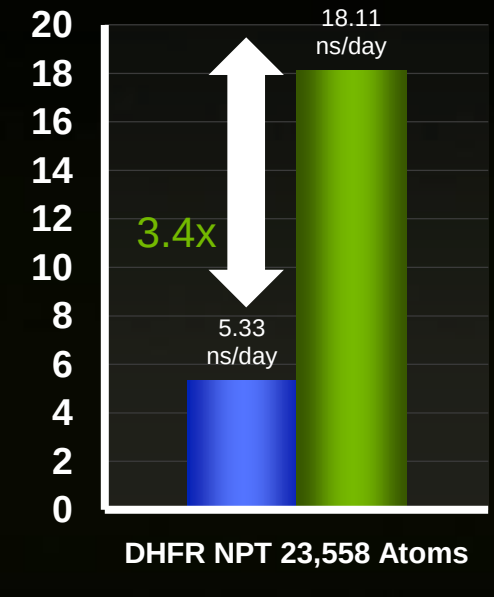
ns/
day



■ 2x Intel Quad Core E5462
2.8 GHz

Explicit (PME) Solvent

ns/
day



■ Tesla C2050 GPU

Data courtesy of San Diego Supercomputing Center

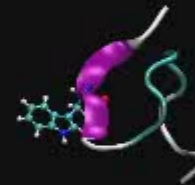
“Everything that living things do can be understood in terms of the jiggings and wiggings of atoms”

Richard Feynman

AMBER 10 - TRP Cage - 1 x E5462 cpu



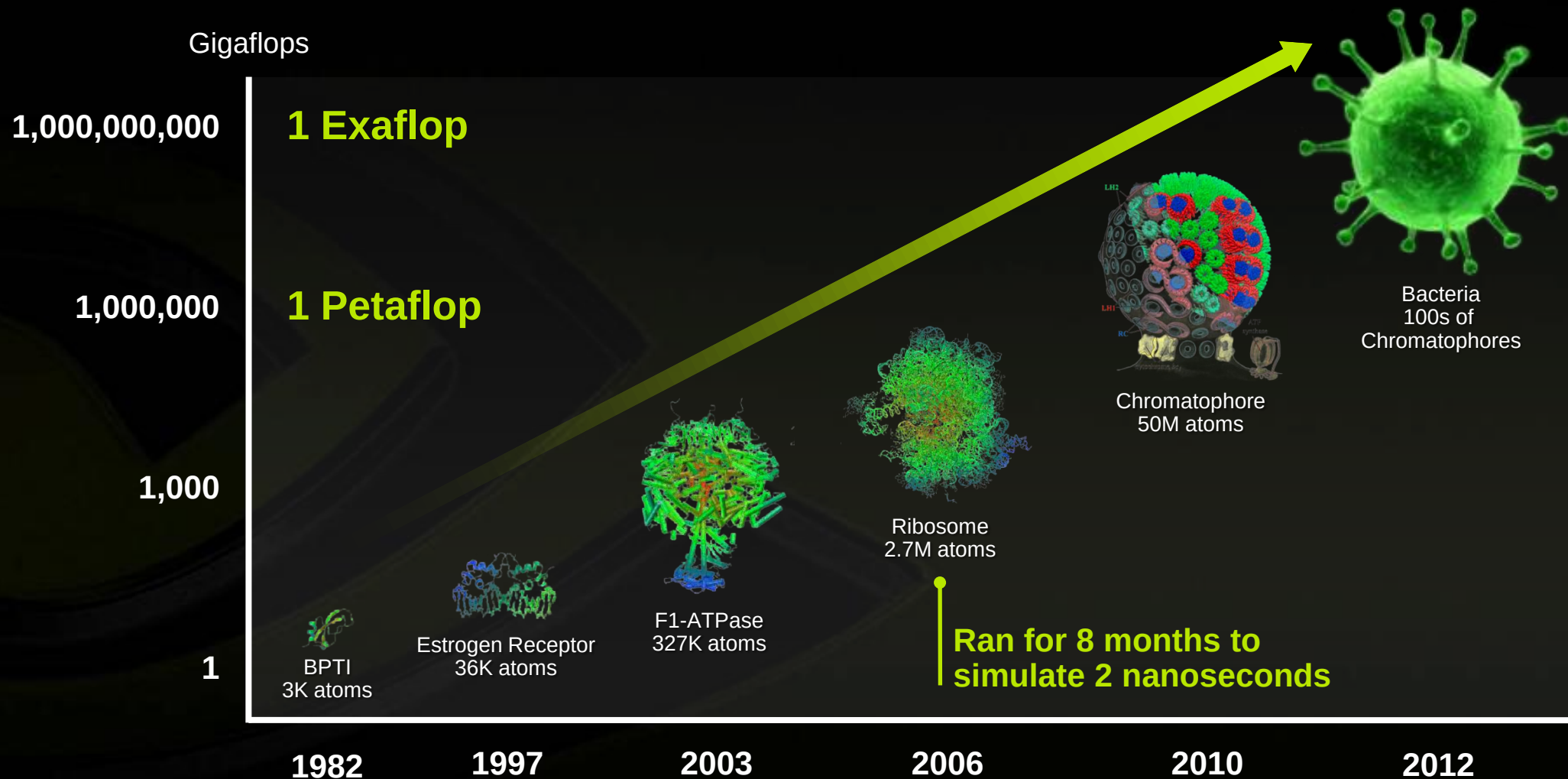
AMBER 10 - TRPCage - 1 x NVIDIA C1060



Приложения программы Tesla Bio Workbench

- AMBER (MD)
- ACEMD (MD)
- GAMESS (QC)
- GROMACS (MD)
- GROMOS (MD)
- LAMMPS (MD)
- NAMD (MD)
- TeraChem (QC)
- VMD (Visualization MD & QC)
- Docking
 - Hex Protein Docking
- Sequence analysis
 - CUDA-BLASTP
 - CUDASW++ (SmithWaterman)
 - MUMmerGPU
 - GPU-HMMER
 - CUDA-MEME Motif Discovery
 - CUDA-EC Short-read error correction

Реальные потребности в вычислительной мощности



СПАСИБО

