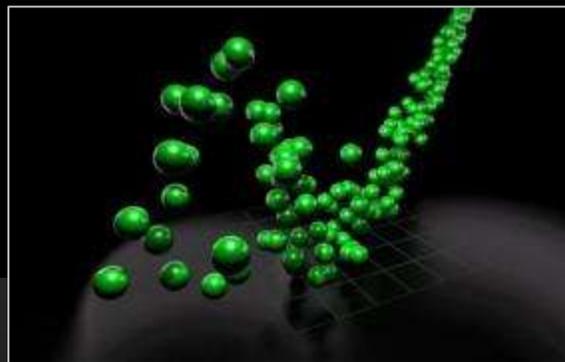


NVIDIA TESLA



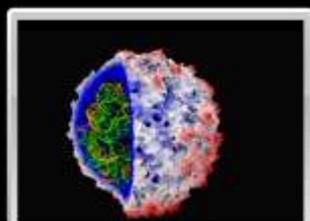
ДЛЯ ЗАДАЧ БИОИНФОРМАТИКИ И БИОМЕДИЦИНЫ

http://www.nvidia.ru/bio_workbench



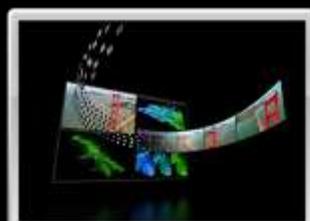
146X

Медицинская
визуализация
Университет Юты Университет Иллинойса



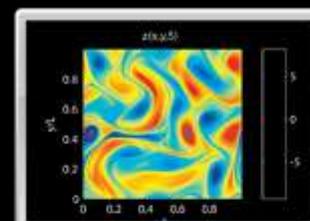
36X

Молекулярная
динамика



18X

Обработка видео
Elemental Tech



50X

Matlab
AccelerEyes



100X

Астрофизика
RIKEN

GPU ускоряет научные вычисления



149X

Финансовое
моделирование
Оксфорд



47X

Линейная алгебра
Университет Джейм



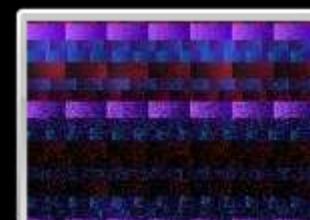
20X

3D УЗИ
Techniscan



130X

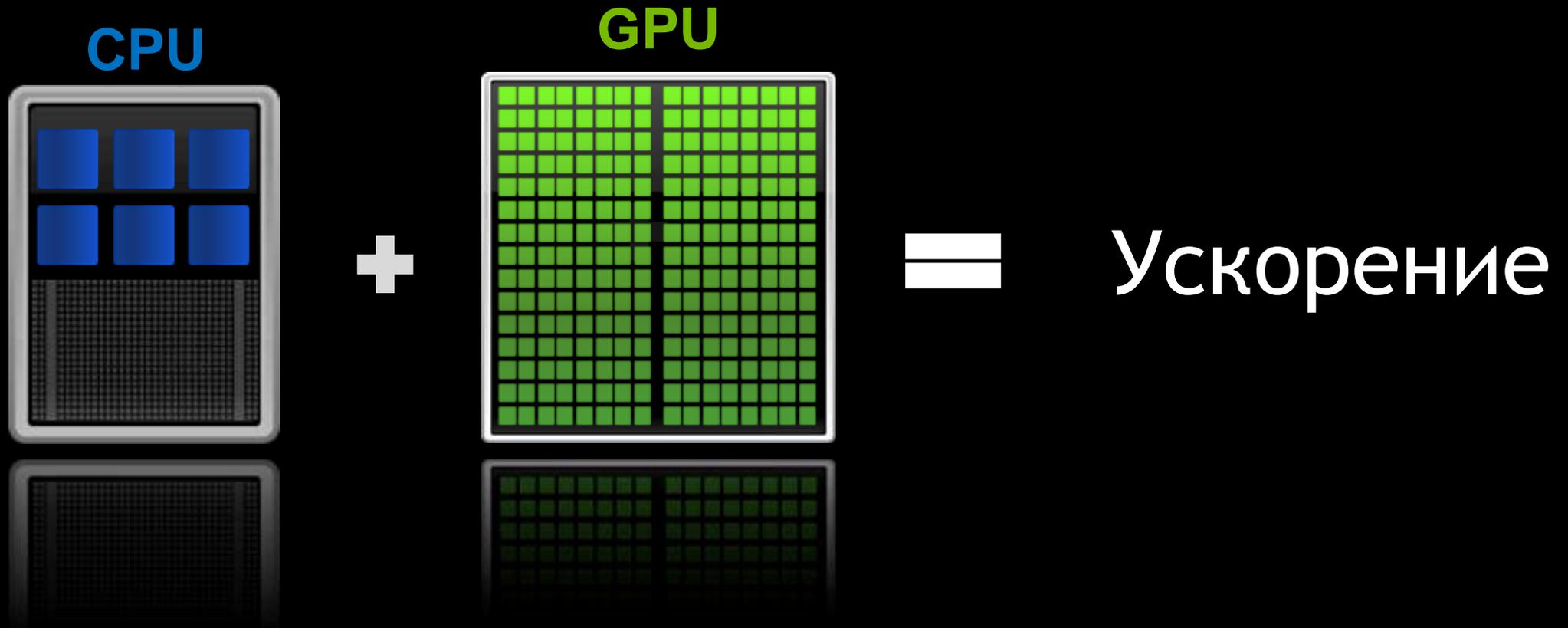
Квантовая химия
Университет
Иллинойса



30X

Геномика
Университет
Мериленда

Гетерогенные вычисления



GPU Tesla в основе 3 из Top 5 СК

#2 : Tianhe-1A

7168 Tesla GPU's 2.5 PFLOPS



#4 : Nebulae

4650 Tesla GPU's 1.2 PFLOPS



#5 : Tsubame 2.0

4224 Tesla GPU's 1.194 PFLOPS



“

Мы не только создали самый быстрый компьютер, но так же внедрили гетерогенную вычислительную архитектуру, использующую CPU и GPU, это действительно инновация. ”

Премьер министр Вен Цзябао
Публичный комментарий Tianhe-1A

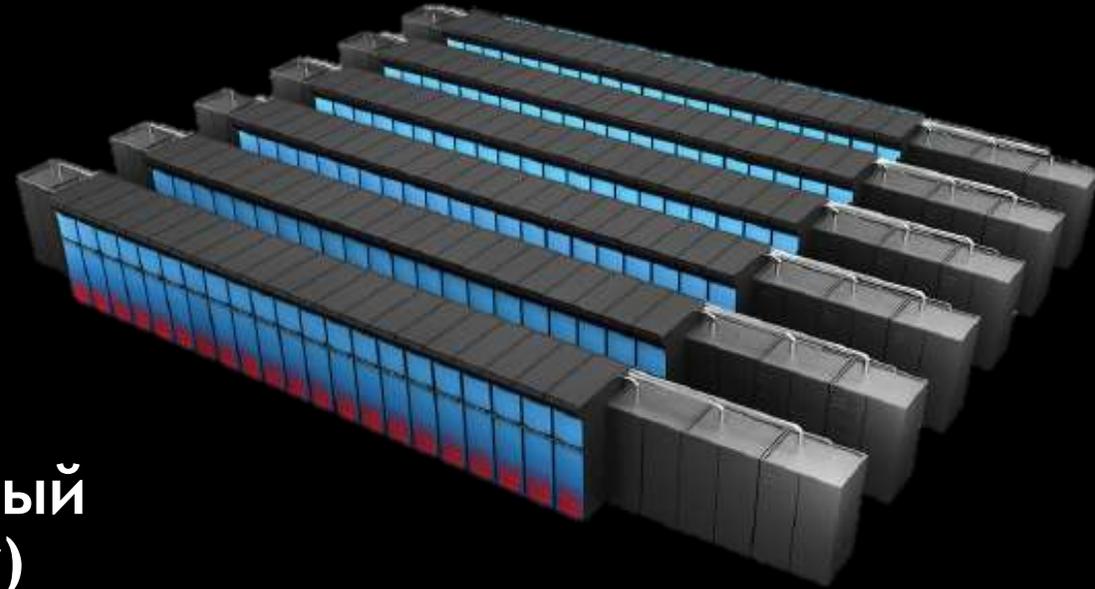
Будущее сегодня



18,000+ Tesla GPUs

20+ PetaFlops

В 3 раза более энергоэффективный
по сравнению с #1 (К Computer)



TITAN

Самый быстрый вычислитель для задач МД

Эффективная производительность 1.87 Petaflops/s

Institute of Process Engineering (IPE)
Chinese Academy of Sciences (CAS)

Моделирование кристаллического кремния



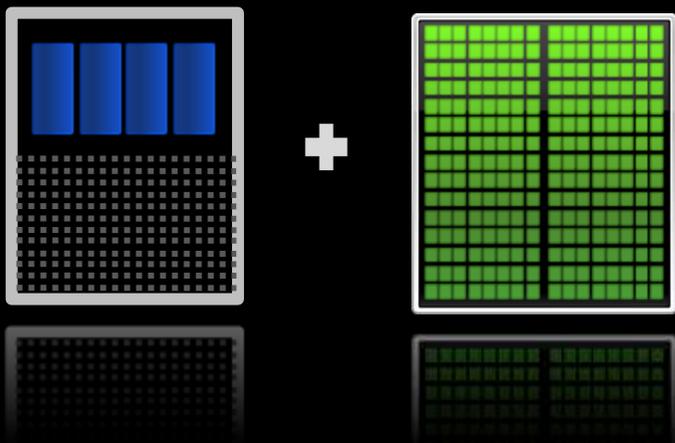
Использованы все 7168 Tesla GPU



Два СК, построенных одновременно

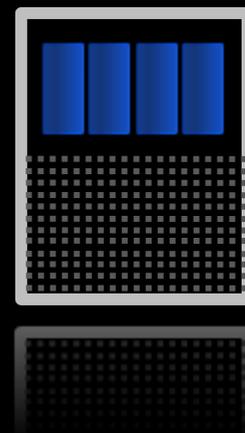
Tsubame 2.0

Hopper- NERSC



4,224 Tesla GPU + 2,816 x86 CPU

1.4 МВт



12,784 x86 CPU

4.0 МВт

Самый *зеленый* петафлопсный компьютер

Мировой рекорд производительности в AMBER

4 Tesla M2090 GPUs
+ 2 CPUs
69 нс/день



192 Quad-Core CPUs
46 нм/день



Быстрее

=

Большой размер
молекул

=

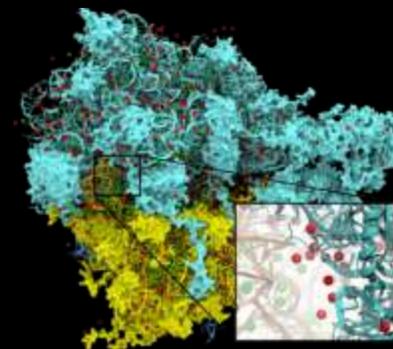
Большой реализм



TESLA позволяет выполнять сканирование быстрее, точнее и с меньшей дозой облучения. Специализированный алгоритм, разработанный в UCSD и, использующий TESLA сокращает дозу облучения в 70 раз.



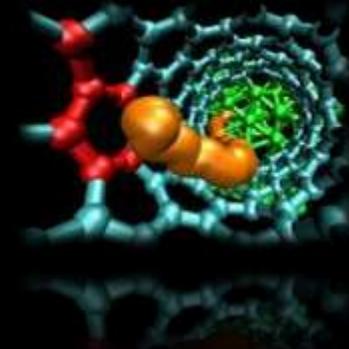
Молекулярная динамика



Приложение	Функционал	Ускорение	Статус	Примечание
AMBER	PMEMD : Explicit & Implicit Solvent	8X	V11 Released	Single and multi-GPUs. Expect 2x more performance in V11 patch release (shortly)
GROMACS	Implicit (5x), Explicit (2x) Solvent	2x-5x	Single GPU Version 4.5.4	Next release: 2H2011 Better Explicit, MPI
LAMMPS	Lennard-Jones, Gay-Berne	6x	Released	Single and multi-GPU.
NAMD	Non-bond force calculation	2x-7x	Released, v2.8	Single and multi-GPU.

GPU Perf compared against Multi-core x86 CPU socket.
GPU Perf benchmarked on GPU supported features
and may be a kernel to kernel perf comparison

Вычислительная химия

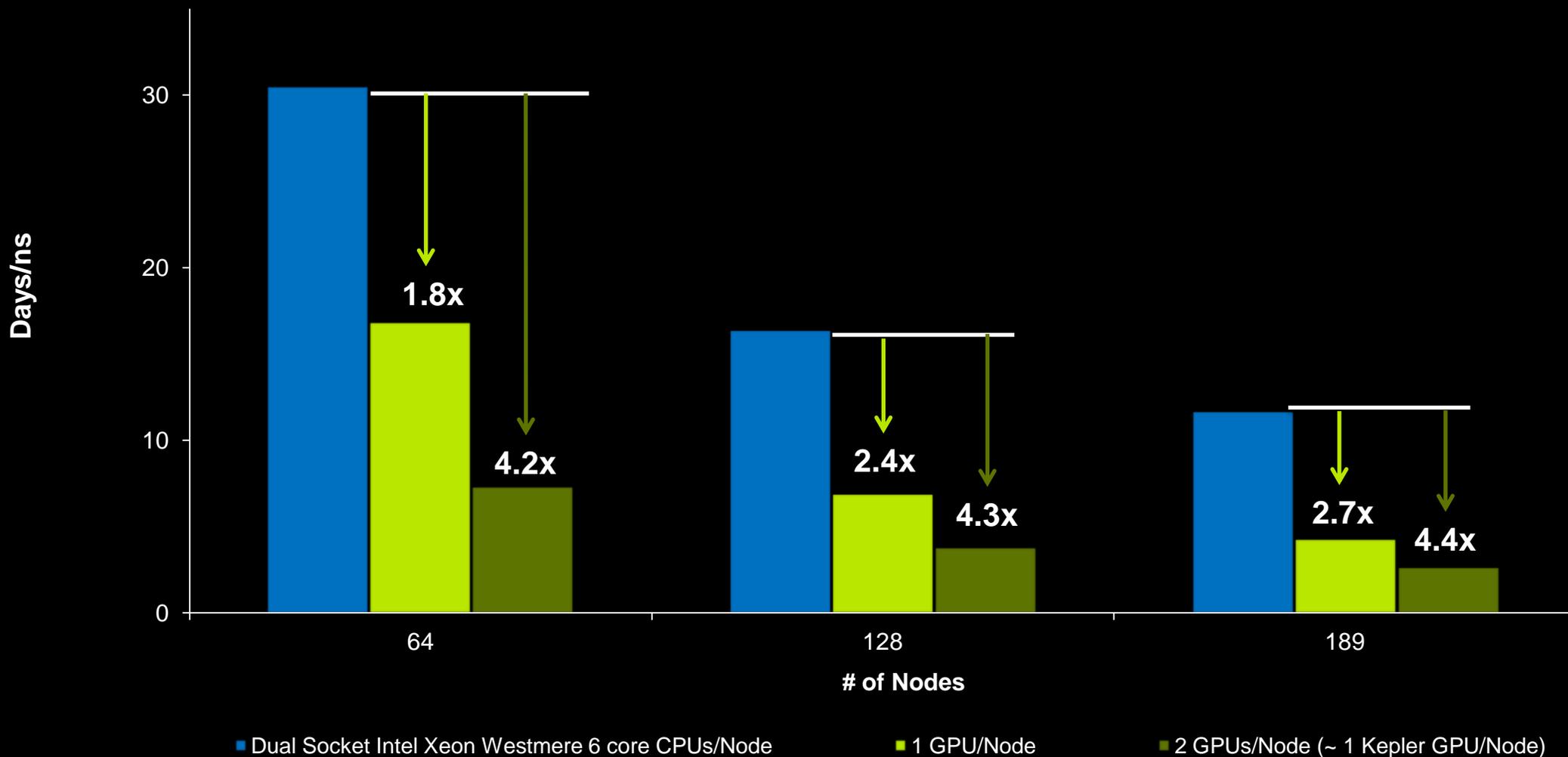


Приложение	Функционал	Ускорение	Статус	Примечание
GAMESS-US	Libqc with Rys Quadrature Algorithm, integral evaluation, closed shell Fock matrix construction	2.5X	Released	Single GPU supported. Multi-GPU supported in July 2011 release.
NWChem	Triples part of Reg-CCSD(T), CCSD & EOMCCSD task schedulers	3-8X projected	Date TBA, in development	Benchmarks: www.nwchem-sw.org
Q-CHEM	Various features including RI-MP2	8-14x projected	Date TBA, In development	Significant porting already
TeraChem	"Full GPU-based solution"	44-650X vs. GAMESS CPU ver.	Version 1.45 released	Single and Multi-GPU. Completely redesigned for GPUs

GPU Perf compared against Multi-core x86 CPU socket.
 GPU Perf benchmarked on GPU supported features
 and may be a kernel to kernel perf comparison

Масштабирование производительности GPU в NAMD

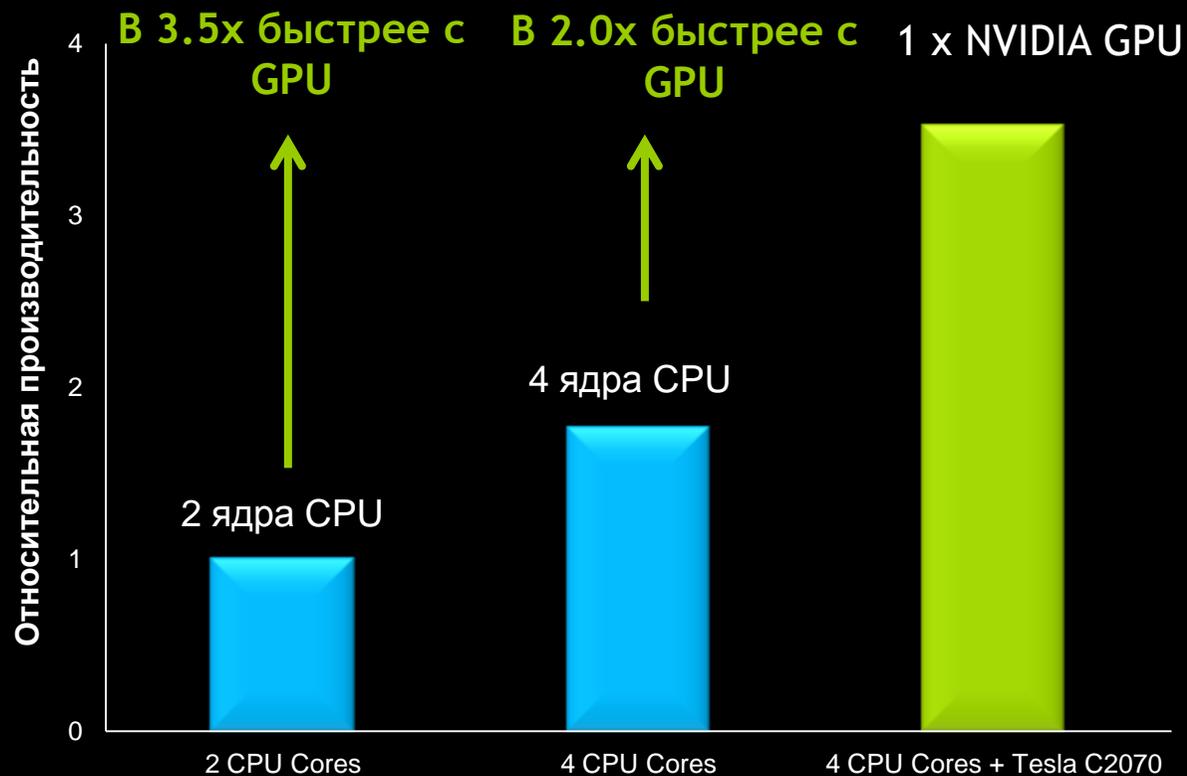
STMV Benchmark on Tsubame 2.0



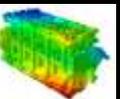
Gaussian будет ускорен на CUDA

Aug. 29, 2011 — NVIDIA announced plans with Gaussian, Inc., and The Portland Group® (PGI) to develop a future GPU-accelerated release of Gaussian, the world's leading software application for quantum chemistry.

GPU для SIMULIA Abaqus/Standard 6.11



Benchmark: s4b Model- Engine Geometry, 5M DOF,
Static nonlinear, Direct Sparse
CPU: Hex-core Xeon 5680 at 3.33 GHz



3 способа получить ускорение

Приложение

Библиотеки

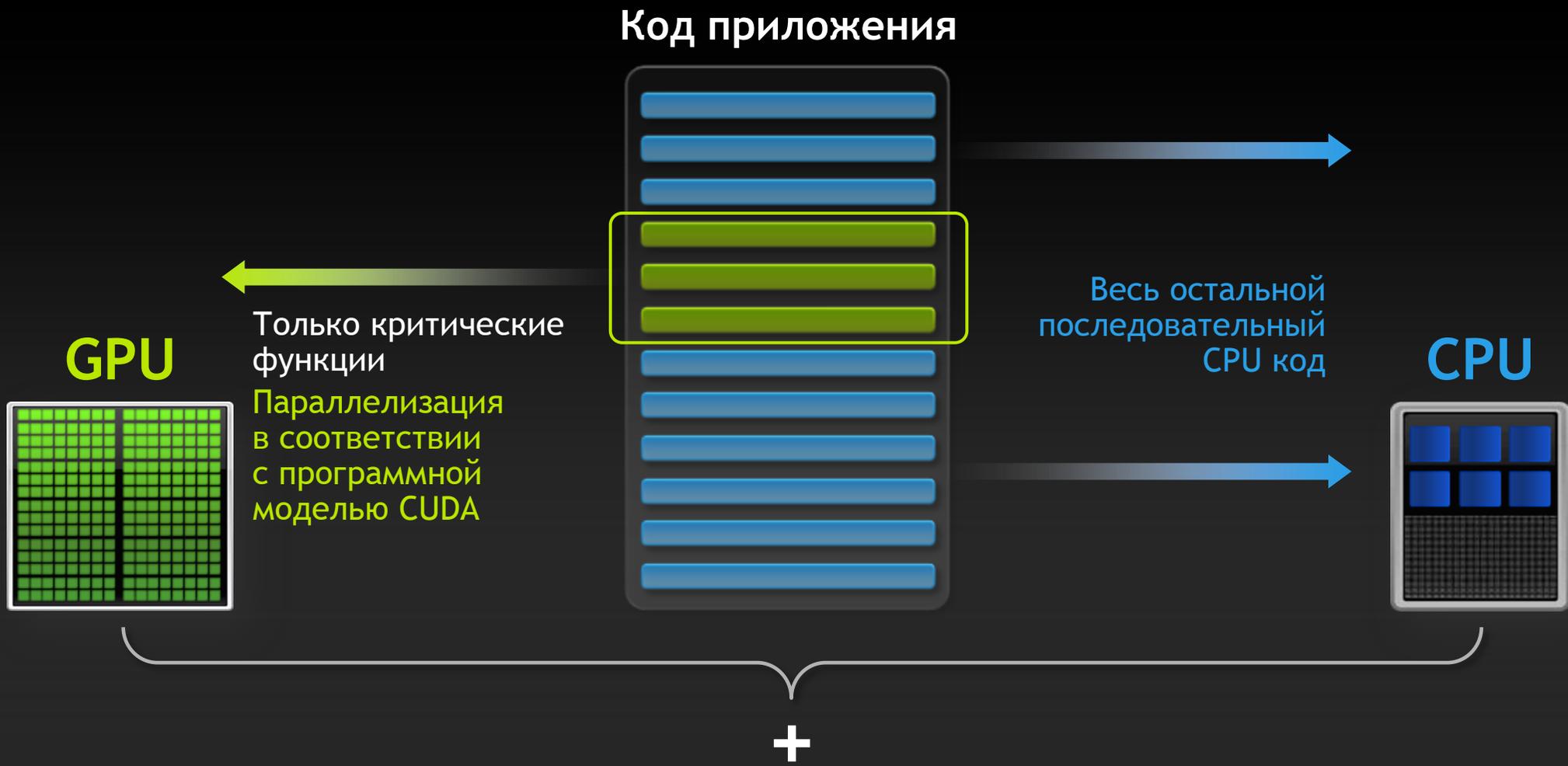
Директивы

Языки
программирования

Самый простой путь для 2-10 кратного ускорения

Максимум
производительности

Минимальное портирование для значительного ускорения



CUDA для вас

2-х дневный семинар обучение программированию на CUDA

АНКЕТА УЧАСТНИКА СЕМИНАРА ПО ВЫЧИСЛЕНИЯМ НА GPU

№НО _____

Организация _____

Сфера деятельности _____

E-mail _____

Количество сотрудников от вашей организации для обучения CUDA _____

№	№НО
1	
2	
3	

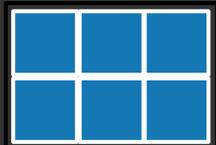
Специфичные темы по вычислениям на GPU, которые вы хотели бы услышать в рамках семинара

Контакты: Дмитрий Копыгин
dkopygin@nvidia.com
+7 916 442 30 96
www.nvidia.ru/cuda

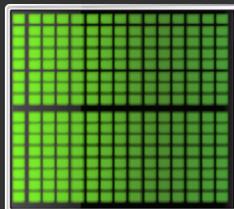
Директивы: добавление нескольких строк кода

Директивы

CPU



GPU



```
main() {
  double pi = 0.0; long i;

  #pragma omp acc_region_loop
  #pragma omp parallel for reduction(+:pi)
  for (i=0; i<N; i++)
  {
    double t = (double)((i+0.05)/N);
    pi += 4.0/(1.0+t*t);
  }
  #pragma omp end acc_region_loop
  printf("pi = %f\n", pi/N);
}
```

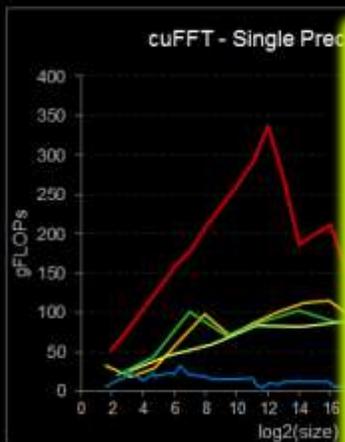
- **Минимум изменений**
- **Значимое ускорение**
- **Независимость от платформы**

Подробности по email: dkonyagin@nvidia.com

GPU библиотеки: простота использования

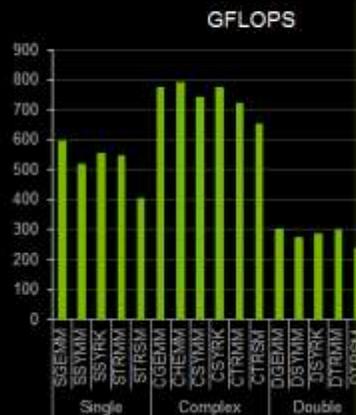
FFTs up to 10x Faster than MKL

1D used in audio processing and as a foundation for 2D and 3D FFTs



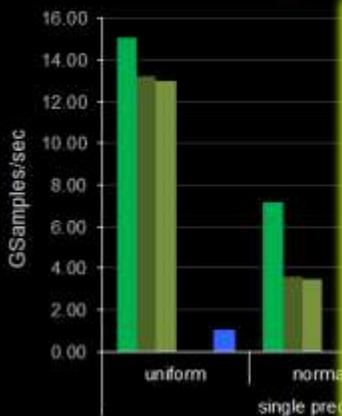
cuBLAS Level 3 Performance

Up to ~800GFLOPS and ~17x speedup over MKL



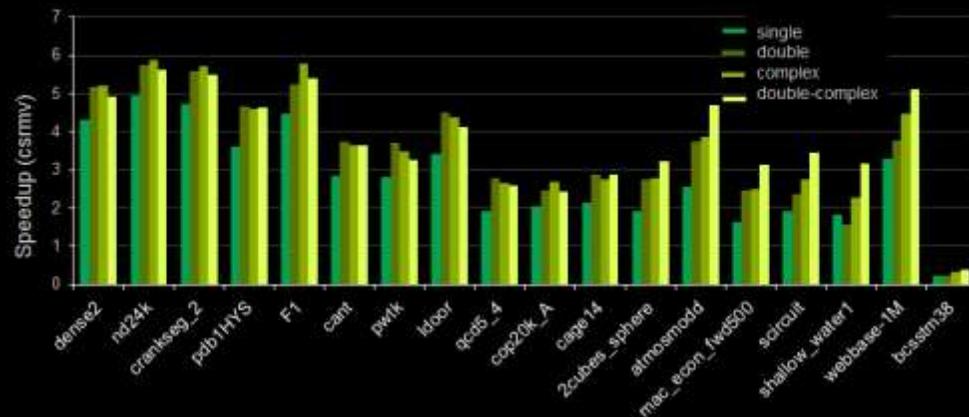
cuRAND Performance

cuRAND 64-bit Scrambled Sobol' 8x faster than MKL 32-bit plain Sobol'



cuSPARSE is up to 6x Faster than MKL

Sparse Matrix x Dense Vector



CUDA tools



Dense Linear Algebra



Parallel Algorithms

QUDA

Lattice QCD

Вопросы

