



ВЫЧИСЛЕНИЯ НА GPU ОТ МОБИЛЬНЫХ УСТРОЙСТВ ДО СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ

Дмитрий Конягин

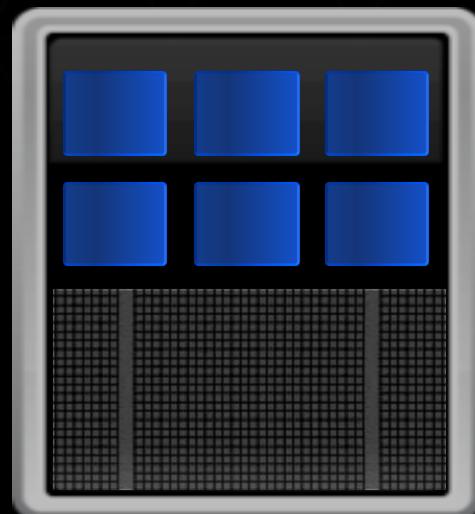


ГИБРИДНЫЕ ВЫЧИСЛЕНИЯ

ПРАВИЛЬНЫЙ ПРОЦЕССОРА ДЛЯ ПРАВИЛЬНЫХ ЗАДАЧ

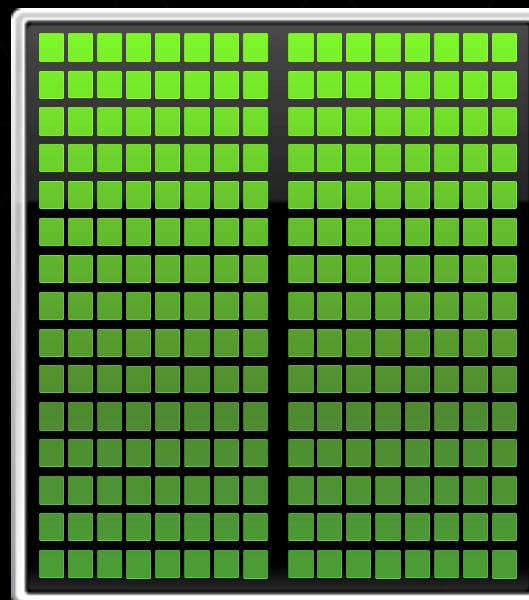
CPU

Оптимизирован для
последовательных задач



GPU ускоритель

Оптимизирован для
параллельных задач





TESLA® GPUS ЛЕЖАТ В
ОСНОВЕ 85%
ГИБРИДНЫХ НРС СИСТЕМ

ВЕДУЩИЕ МИРОВЫЕ
КОМПАНИИ
ИСПОЛЬЗУЮТ TESLA ДЛЯ
АНАЛИЗА БОЛЬШИХ
ДАННЫХ, ОБРАБОТКИ
ИЗОБРАЖЕНИЙ И
МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

ПЕРВЫЙ В МИРЕ СЕРВЕР НА БАЗЕ POWER8 С GPU

IBM POWER S824L



- ▶ 2x POWER8 CPU
- ▶ До 1TB памяти
- ▶ Пропускная способность памяти до 384 GB/s
- ▶ 2 ускорителя Tesla K40
- ▶ Linux

Доступно с 31 октября



The Green500 List

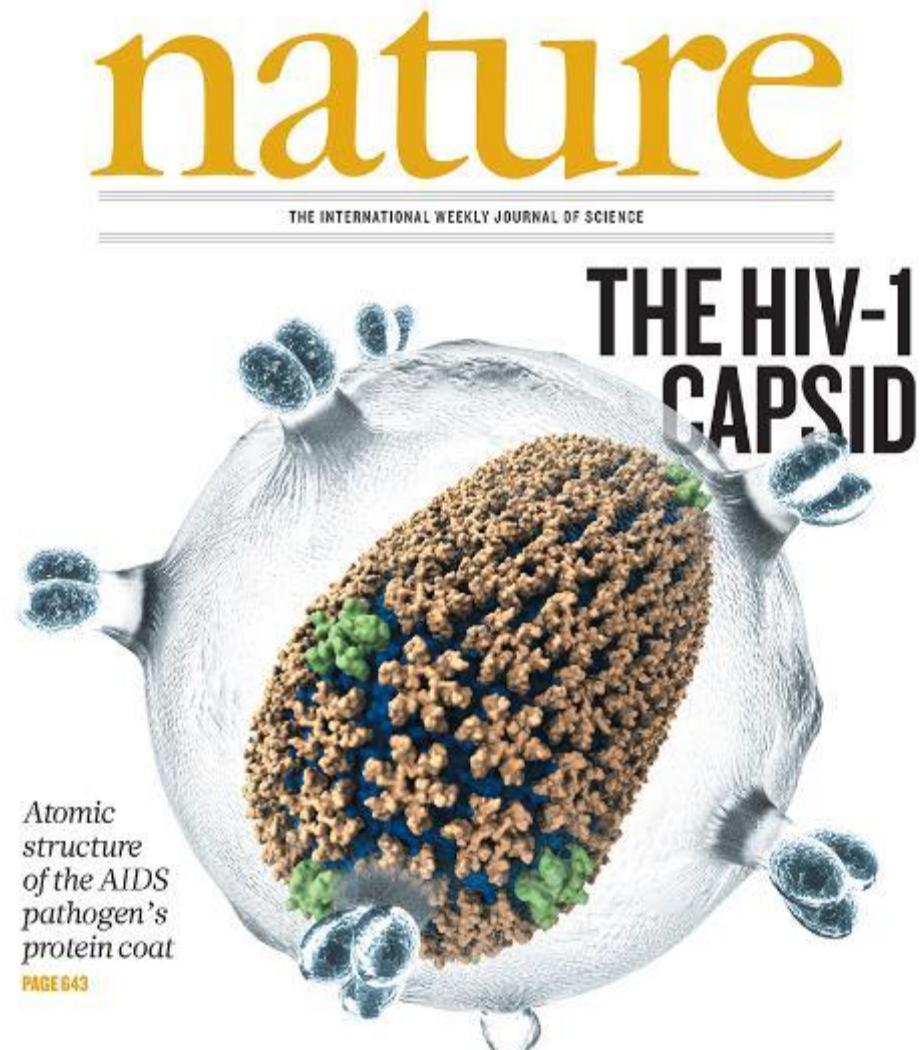
Listed below are the June 2014 The Green500's energy-efficient supercomputers ranked from 1 to 100.

| Green500 Rank | MFLOPS/W | Site* | Computer* | Total Power (kW) |
|---------------|----------|--|--|------------------|
| 1 | 4,389.82 | GSIC Center, Tokyo Institute of Technology | TSUBAME-KFC - LX 1U-4GPU/104Re-1G Cluster, Intel Xeon E5-2620v2 6C 2.100GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 34.58 |
| 2 | 3,631.70 | Cambridge University | Wilkes - Dell T620 Cluster, Intel Xeon E5-2630v2 6C 2.600GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20 | 52.62 |
| 3 | 3,517.84 | Center for Computational Sciences, University of Tsukuba | HA-PACS TCA - Cray 3623G4-SM Cluster, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband QDR, NVIDIA K20x | 78.77 |
| 4 | 3,459.46 | SURFsara | Cartesius Accelerator Island - Bullx B515 cluster, Intel Xeon E5-2450v2 8C 2.5GHz, InfiniBand 4x FDR, Nvidia K40m | 44.40 |
| 5 | 3,185.91 | Swiss National Supercomputing Centre (CSCS) | Piz Daint - Cray XC30, Xeon E5-2670 8C 2.600GHz, Aries interconnect, NVIDIA K20x Level 3 measurement data available | 1,753.66 |
| 6 | 3,131.06 | ROMEO HPC Center - Champagne-Ardenne | romeo - Bull R421-E3 Cluster, Intel Xeon E5-2650v2 8C 2.600GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 81.41 |
| 7 | 3,019.72 | CSIRO | CSIRO GPU Cluster - Nitro G16 3GPU, Xeon E5-2650 8C 2GHz, Infiniband FDR, Nvidia K20m | 86.20 |
| 8 | 2,951.95 | GSIC Center, Tokyo Institute of Technology | TSUBAME 2.5 - Cluster Platform SL390s G7, Xeon X5670 6C 2.93GHz, Infiniband QDR, NVIDIA K20x | 927.86 |
| 9 | 2,813.14 | Exploration & Production - Eni S.p.A. | HPC2 - iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.8GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 1,067.49 |
| 10 | 2,678.41 | Financial Institution | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband, NVIDIA K20x | 54.60 |
| 11 | 2,629.42 | Financial Institution | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 66.25 |
| 12 | 2,629.42 | Financial Institution | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 66.25 |
| 13 | 2,629.42 | Financial Institution | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 66.25 |
| 14 | 2,629.42 | Financial Institution | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband FDR, NVIDIA K20x | 66.25 |
| 15 | 2,629.10 | Max-Planck-Gesellschaft MP/IPP | iDataPlex DX360M4, Intel Xeon E5-2680v2 10C 2.800GHz, Infiniband, NVIDIA K20x | 269.94 |

ОСНОВНАЯ ТРУДНОСТЬ ДЛЯ СВЕРХБОЛЬШИХ НРС СИСТЕМ:

ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНОСТЬ

GPU СОЗДАННЫ ДЛЯ ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫХ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ.



УСКОРЕНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ
используя 3000 ПРОЦЕССОРОВ TESLA

УЧЕНЫЕ ИЗ УНИВЕРСИТЕТА
ИЛЛИНОЙСА ОСУЩЕСТВИЛИ
ПЕРВУЮ ПОЛНУЮ СИМУЛЯЦИЮ
АТОМА ВИЧ И ОТКРЫЛИ СТРУКТУРУ
ЕГО ПРОТЕИНОВОЙ ОБОЛОЧКИ



POPULAR GPU-ACCELERATED APPLICATIONS

| CONTENTS | |
|----------|---|
| 02 | Research: Higher Education and Supercomputing |
| 03 | COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND BIOLOGY |
| 04 | BIOINFORMATICS |
| 05 | WEATHER AND CLIMATE FORECASTING |
| 06 | Defense and Intelligence |
| 07 | Computational Finance |
| 08 | Manufacturing: CAD and CAE |
| 09 | COMPUTER AIDED DESIGN |
| 10 | CONSTRUCTION, PLANT STRATEGIES |
| 11 | COMPUTER-AIDED CIVIL MECHANICS |
| 12 | ELECTRICAL DESIGN AUTOMATION |
| 13 | Media and Entertainment |
| 14 | INNOVATION, MODELING AND RENDERING |
| 15 | COLOR CORRECTION AND GRINN MANAGEMENT |
| 16 | COMPOSING, PUBLISHING AND EXPORTS |
| 17 | EDITORS |
| 18 | ENTERTAINMENT AND DIGITAL DISTRIBUTION |
| 19 | 3D AIR GRAPHICS |
| 20 | ON-SET, REVIEW AND STEREO TOOLS |
| 21 | SIMULATION |
| 22 | WEATHER GRAPHICS |
| 23 | 14. Oil and Gas |

Research: Higher Education and Supercomputing

COMPUTATIONAL CHEMISTRY AND BIOLOGY

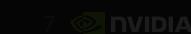
Bioinformatics

| APPLICATION | DESCRIPTION | COMPUTER NUMBERS | GPU FOR GPU-UP | RECOMMENDED GPU | GPU SUPPORT | RELEASE DATE |
|-------------|--|---|----------------|------------------------------|-------------|---------------------------------|
| BAMBI-CUDA | Sequence mapping software | Alignment of short sequencing reads | 0-10s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 0.4.2 |
| CUSASIM++ | Open source software for Smith-Waterman protein database searches on GPUs | Parallel search of Smith-Waterman protein database searches on GPUs | 0.5-5s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 2.3.0 |
| CUSHAW | Parallelized short read aligner | Parallel, accurate long read aligner - mapped alignments to large genomes | 10s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 1.0.40 |
| GPU-BLAST | Local search with fast k-mer heuristic | Protein alignment according to blastp, multi-alignments | 3-4s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Single Only | Available now Version 2.2.24 |
| GPU-BIOPER | Parallelized local and global search with profile Hidden Markov Models | Parallel local and global search of Hidden-Markov Models | 0.5-100s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 1.2.2 |
| mCUSA-MEHE | Ultrafast sequence motif discovery algorithm based on MEHE | Scalable motif discovery algorithm based on MEHE | 4-10s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 0.3.12 |
| SeqnFind | A GPU Accelerated Sequence Analysis Toolkit | Reference assembly, local, Smith-Waterman, tBLAST, de-novo assembly | 400s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now |
| USEARCH | Open-source Smith-Waterman for SSE/CUDA, suffix array based repeat filter and repeat | Fast short read aligner | 0.5s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 1.1 |
| WideLM | Fits numerous linear models to a fixed design and response | Parallel linear regression on multiple similarly-shaped models | 100s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 0.1-1 |

Molecular Dynamics

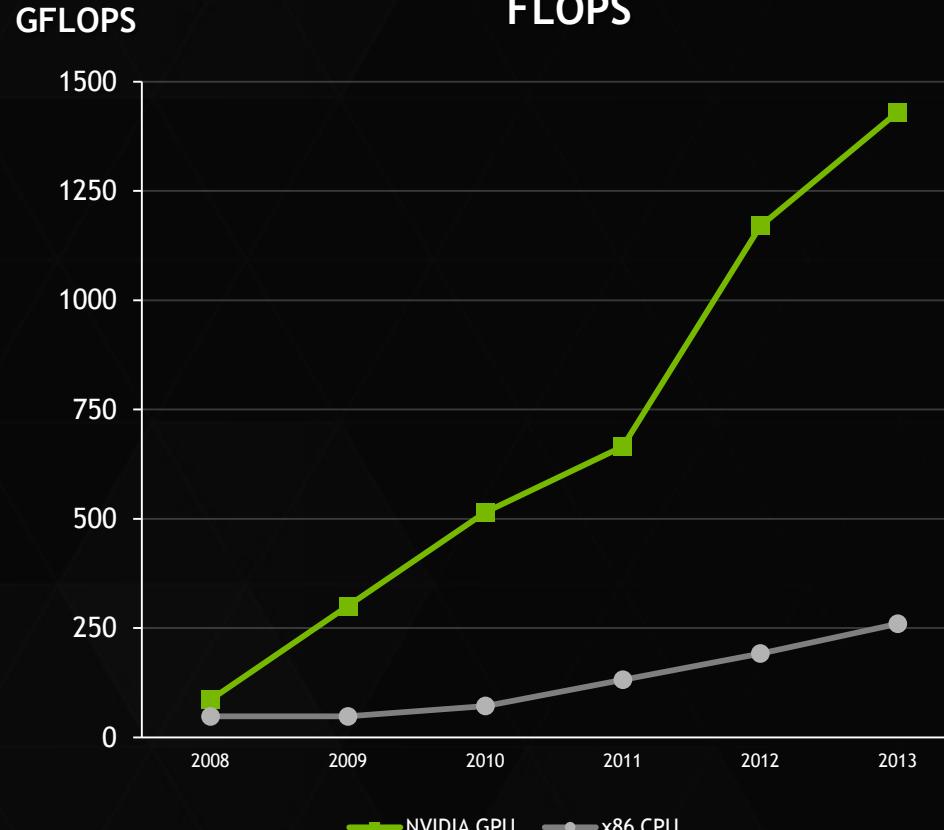
| APPLICATION | DESCRIPTION | COMPUTER NUMBERS | GPU FOR GPU-UP | RECOMMENDED GPU | GPU SUPPORT | RELEASE DATE |
|-------------|---|--|-----------------------------------|------------------------------|------------------------------|---|
| Ab initio | Molecular molecular dynamics of biopolymers for simulations of proteins, DNA and ligands | Simulations (m 1000 GPUs) | 0-2hr | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Single Only | Available now Version 1.0.40 |
| ACEMD | GPU simulation of molecular mechanics force fields, replicated and explicit solvent | Written for use on GPUs | 100 ns/day | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now |
| AMBER | Suite of programs to simulate molecular dynamics on biomolecules | PMEMD: explicit and implicit solvent | 89-44 ns/day | JAC-NVE | Yes | Available now Version 12 + bugfix |
| BL-POLY | Simulate macromolecules, polymers, ionic systems, etc on a distributed memory parallel computer | Two-body forces, Lennard-Jones, Ewald, SPME forces, Shake, VV | 4s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 0.0 Source only |
| CHARMM | MD package to simulate molecular dynamics on biomolecules | Implicit SMD, Explicit SMD Solvent via OpenMM | 100s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | In Development | Q4/17 |
| GRIMMCS | Simulation of biochemical molecules with complicated bond interactions | Implicit SMD, Explicit SMD Solvent via OpenMM | 1-15 ns/day | 100s | Single Only | Available now Version 4.5 in Q4/17 |
| HOOMD-Blue | Particle dynamics package written grounds up for GPUs | Written for GPUs | 3s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now |
| LAMMPS | Classical molecular dynamics package | Lennard-Jones, Morse, Buckingham, CHARM92, Tersoff, Coulomb, Lennard-Jones, Ewald, RR-nsquared, Hybrid, Cut-offs | 0.1s-1hr | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now |
| MD | Designed for high performance simulation of large molecular systems | 100M atom capsule | 0.4-4 ns/day 1.7M/500s 300s | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 2.9 |
| MDMM | Library and application for molecular dynamics for MPC with GPUs | Implicit 127-213 ns/day | T 2070, 2090, K10, K20, K20K | Yes | Available now Version 1.1 | |

275+ приложений с GPU-ускорением
www.nvidia.com/appscatalog

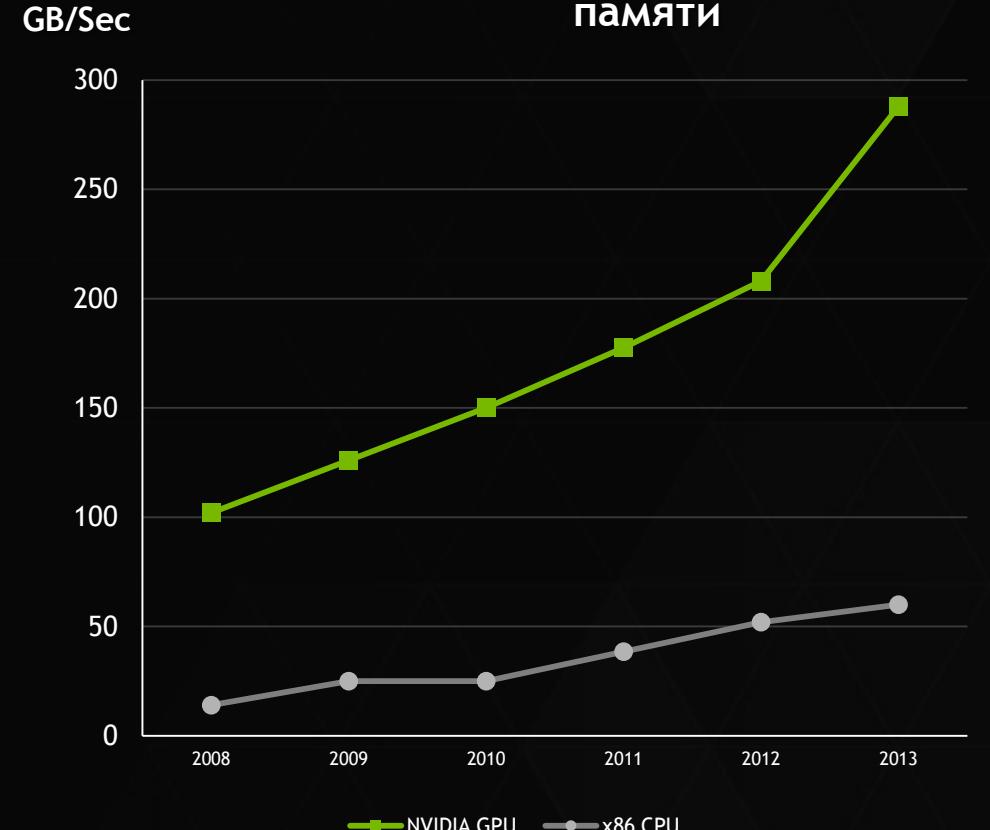


РАЗРЫВ ПРОДОЛЖАЕТ УВЕЛИЧИВАТЬСЯ

Пиковая производительность DP FLOPS

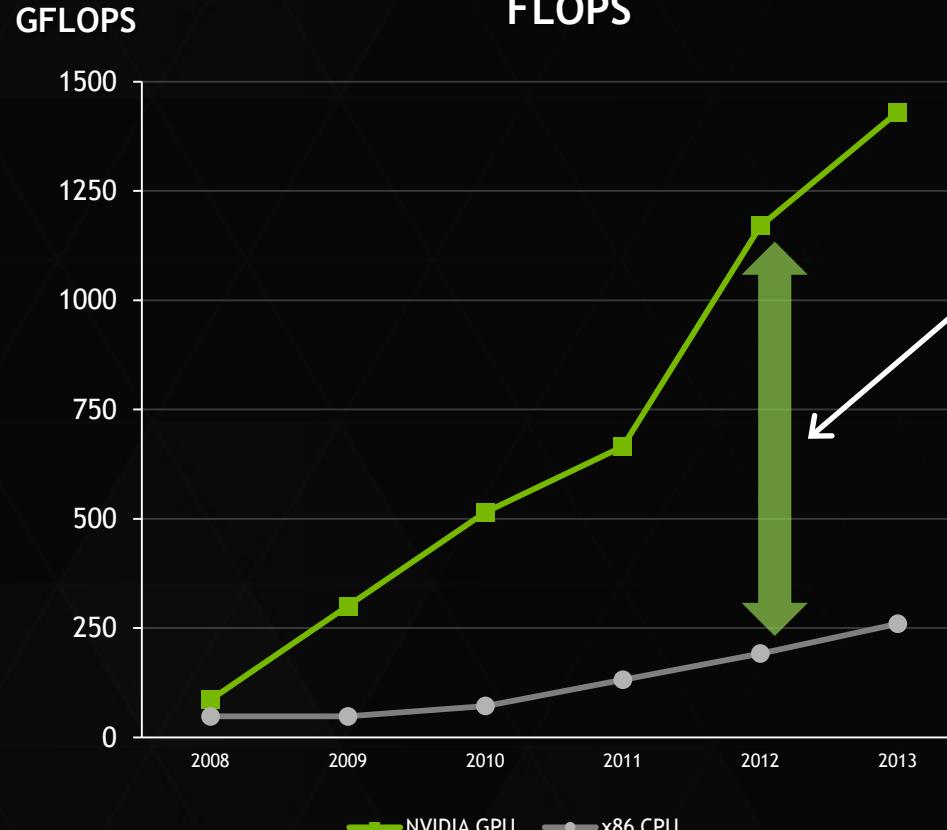


Пиковая пропускная способность памяти

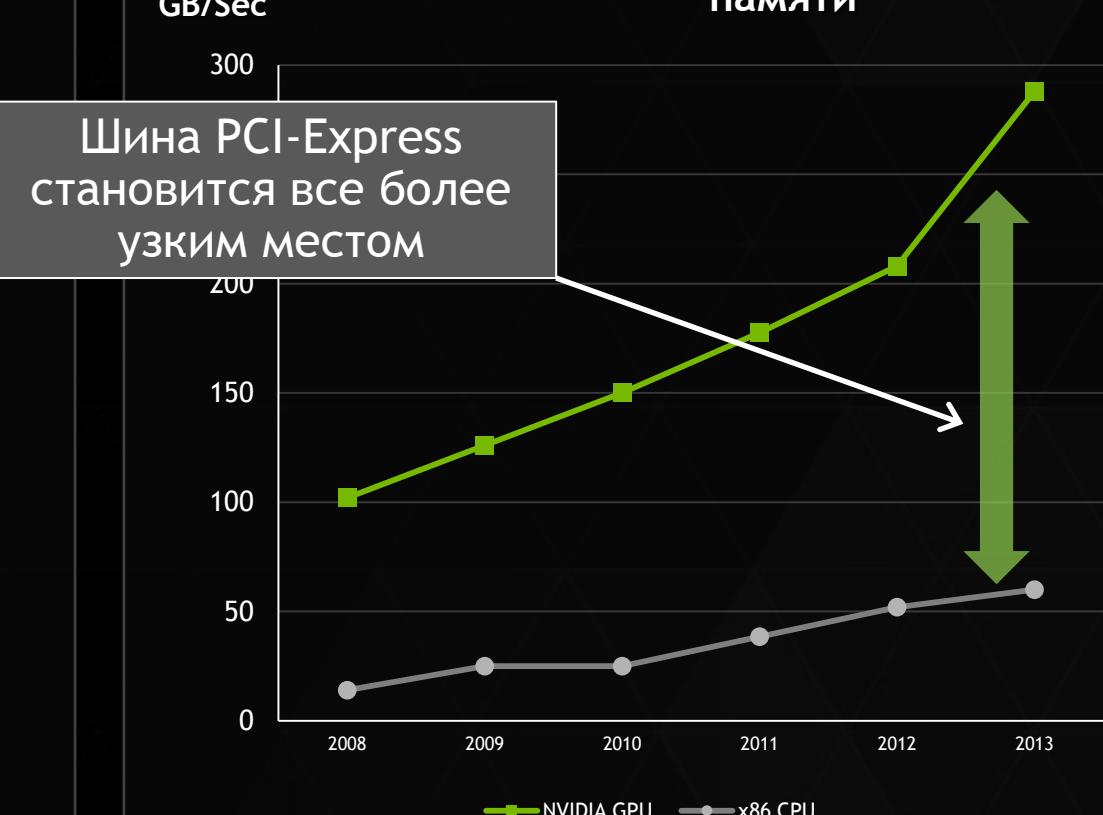


РАЗРЫВ ПРОДОЛЖАЕТ УВЕЛИЧИВАТЬСЯ

Пиковая производительность DP FLOPS



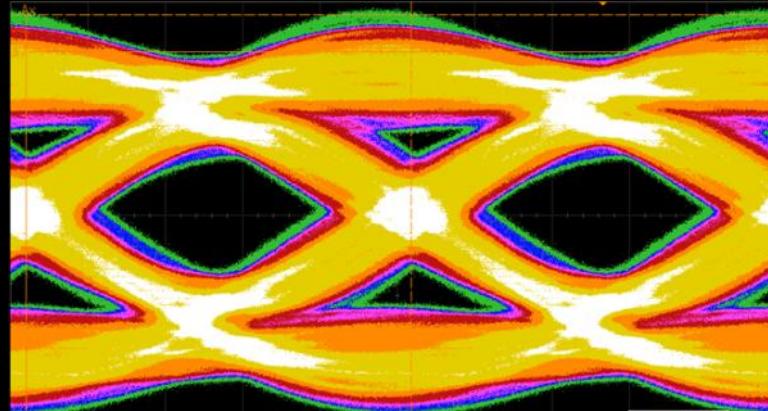
Пиковая пропускная способность памяти



NVLINK И СТЕКОВАЯ 3D ПАМЯТЬ

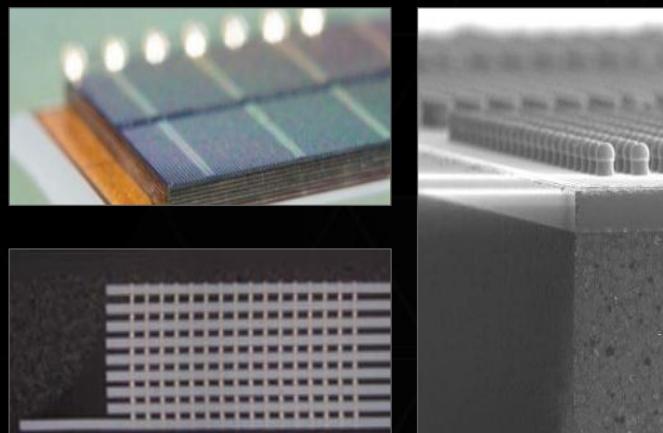
NVLINK

- Высокоскоростной интерфейс между GPU и GPU/CPU
- В 5-12 раз выше пропускная способность, чем у PCI-E Gen3
- Поддрежка в POWER CPU



СТЕКОВАЯ 3D ПАМЯТЬ

- В 4 раза выше пропускная способность (~1 TB/s)
- В 3 раза больший объем
- В 4 раза выше энергоэффективность



ЗА
ПРЕДЕЛАМИ
HPC

*GPU в области аналитики
Больших Данных,
машинного обучения и
промышленных вычислений*

ОТ НРС К АНАЛИТИКЕ БОЛЬШИХ ДАННЫХ

GTC 2009



SIEMENS

Raytheon

GTC 2014



facebook

Google

NAVER

NETFLIX

Palantir

Square

Walmart

YAHOO!

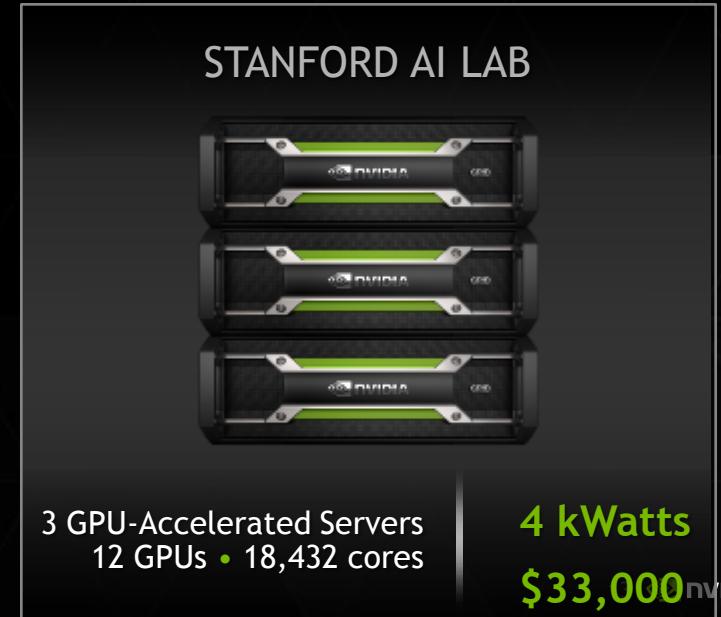
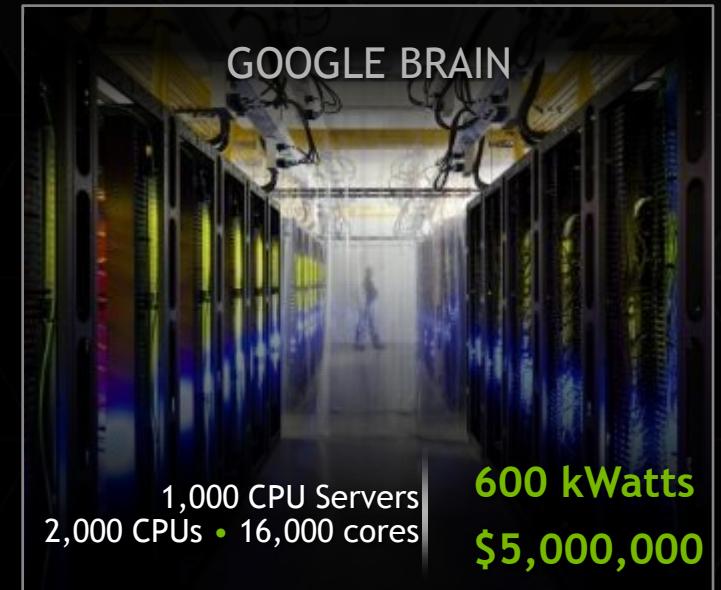
Yandex

Список некоторых участников ежегодной конференции NVIDIA по графическим процессорам

ДОСТУПНОСТЬ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ БЛАГОДАРЯ GPU

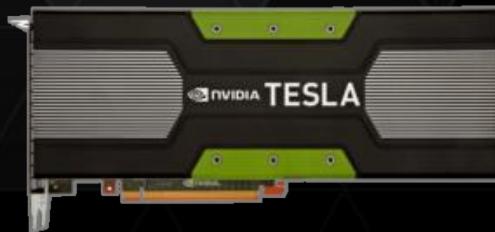
“Now You Can Build Google’s
\$1M Artificial Brain on the Cheap”

-Wired



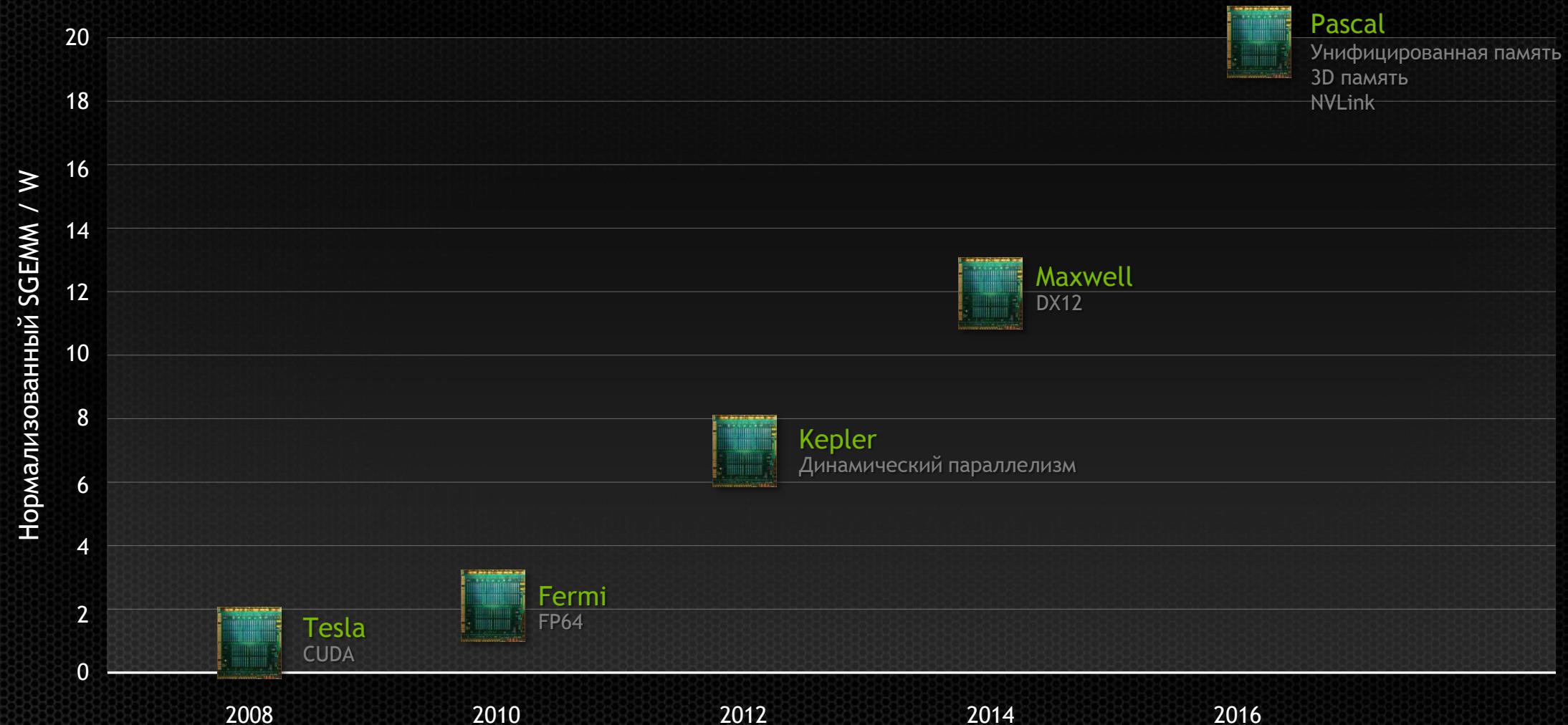
ПРОДУКТОВАЯ ЛИНЕЙКА TESLA

САМЫЕ БЫСТРЫЕ И ЭНЕРГОЭФФЕКТИВНЫЕ УСКОРИТЕЛИ

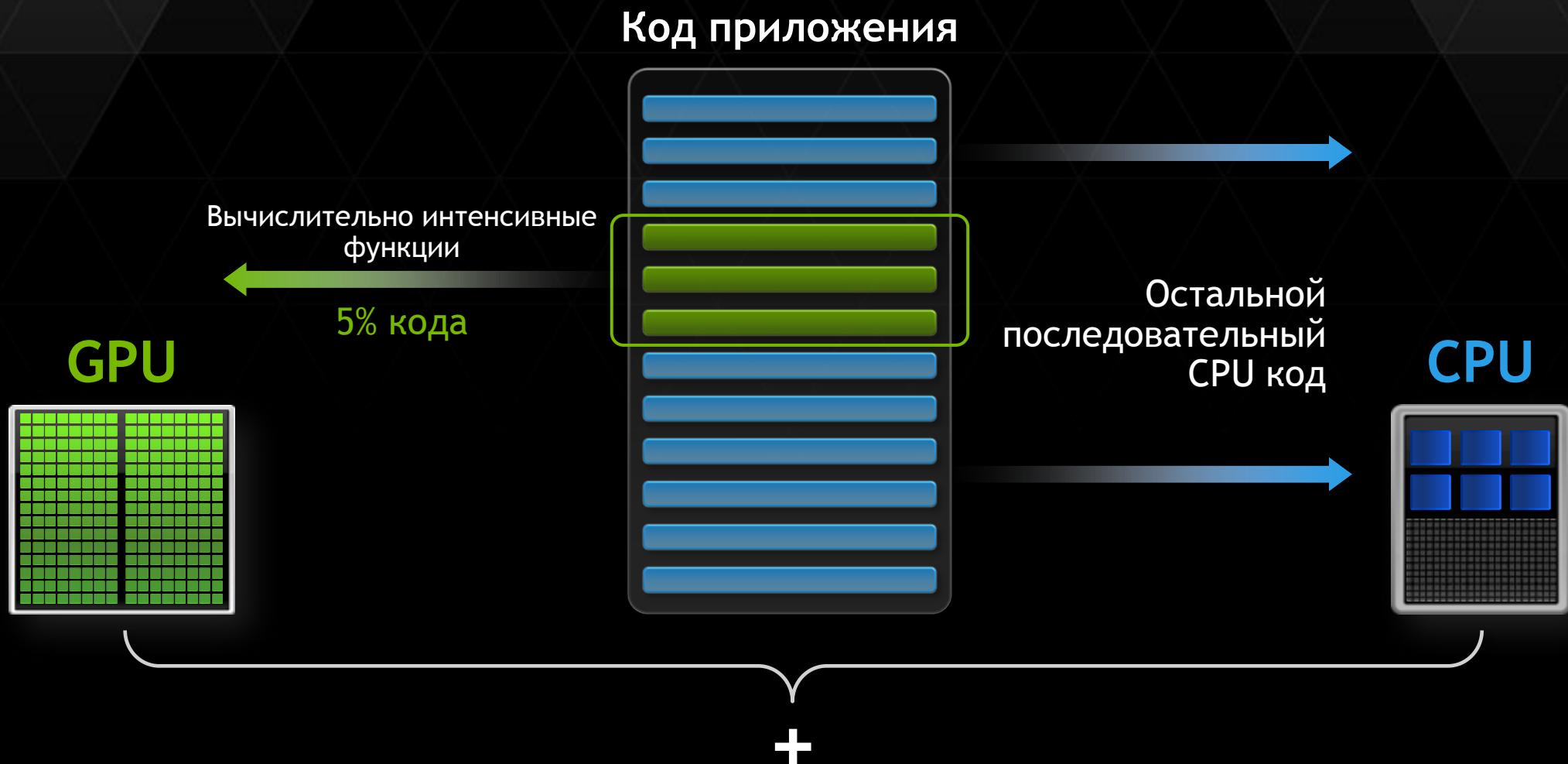


| | GPUs | Single Precision Peak (SGEMM) | Double Precision Peak (DGEMM) | Memory Size | Memory Bandwidth (ECC off) | PCIe Gen | System Solution |
|---|------|-------------------------------|-------------------------------|-------------|----------------------------|----------|----------------------|
| CFD, BioChemistry, Neural Networks, High Energy Physics, Graph analytics, Material Science, BioInformatics, M&E | K40 | 4.29 TF (3.22TF) | 1.43 TF (1.33 TF) | 12 GB | 288 GB/s | Gen 3 | Server + Workstation |
| Weather & Climate, Physics, BioChemistry, CAE, Material Science | K20X | 3.95 TF (2.90 TF) | 1.32 TF (1.22 TF) | 6 GB | 250 GB/s | Gen 2 | Server only |
| | K20 | 3.52 TF (2.61 TF) | 1.17 TF (1.10 TF) | 5 GB | 208 GB/s | Gen 2 | Server + Workstation |
| Image, Signal, Video, Seismic | K10 | 4.58 TF | 0.19 TF | 8 GB | 320 GB/s | Gen 3 | Server only |

УВЕРЕННОЕ РАЗВИТИЕ CUDA GPU



КАК РАБОТАЮТ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА GPU



3 СПОСОБА ПРОГРАММИРОВАТЬ НА GPU

Приложения

Библиотеки

BLAS, FFT, MAGMA & CULA
LAPACK, ...

“copy-paste”
ускорение

Директивы

OpenACC

Простое ускорение
приложение

CUDA

Расширения
C/C++/Fortran

Максимальная
производительность

БИБЛИОТЕКИ С GPU УСОРЕНИЕМ

“COPY-PASTE” УСКОРЕНИЕ ДЛЯ ВАШИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

CUDART

CUDA Runtime Library

cuFFT

Быстрые преобразования Фурье

cuBLAS

Полноценная библиотека основных операции линейной алгебры

cuSPARSE

Библиотека для работы с разреженными матрицами

cuRAND

Библиотека генерации случайных чисел

NPP

Примитивы для обработки изображений и видео

Thrust

Шаблоны алгоритмов и структур данных для C++

math.h

C99 библиотека для работы с числами с плавающей точкой

cuDNN

Библиотека для реализации глубинных нейронных сетей

Входит в состав CUDA Toolkit (бесплатно): developer.nvidia.com/cuda-toolkit

Информация по библиотекам на CUDA : developer.nvidia.com/gpu-accelerated-libraries

ПРОГРАММА ДЛЯ CUDA РАЗРАБОТЧИКОВ

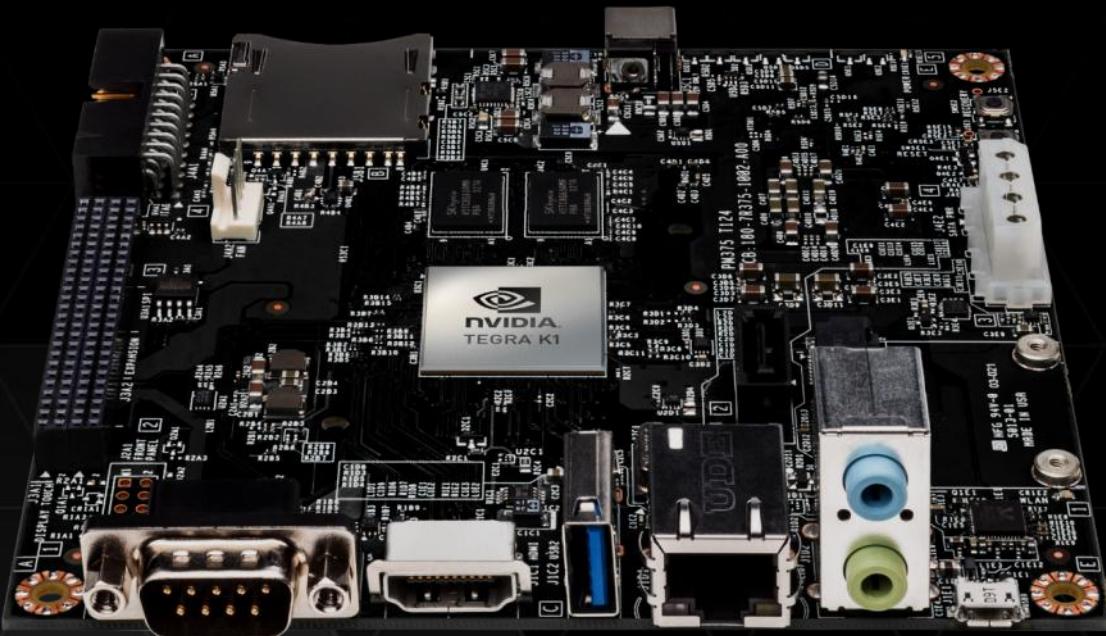
Бесплатная регистрация: www.nvidia.com/paralleldeveloper

- ▶ Exclusive access to pre-release CUDA Installers
- ▶ Submit bugs and features requests to NVIDIA
- ▶ Keep informed about latest releases and training opportunities
- ▶ Access to exclusive downloads
- ▶ Exclusive activities and special offers



JETSON TK1

ПЕРВЫЙ В МИРЕ ВСТРАЕВАЕМЫЙ СУПЕРКОМПЬЮТЕР

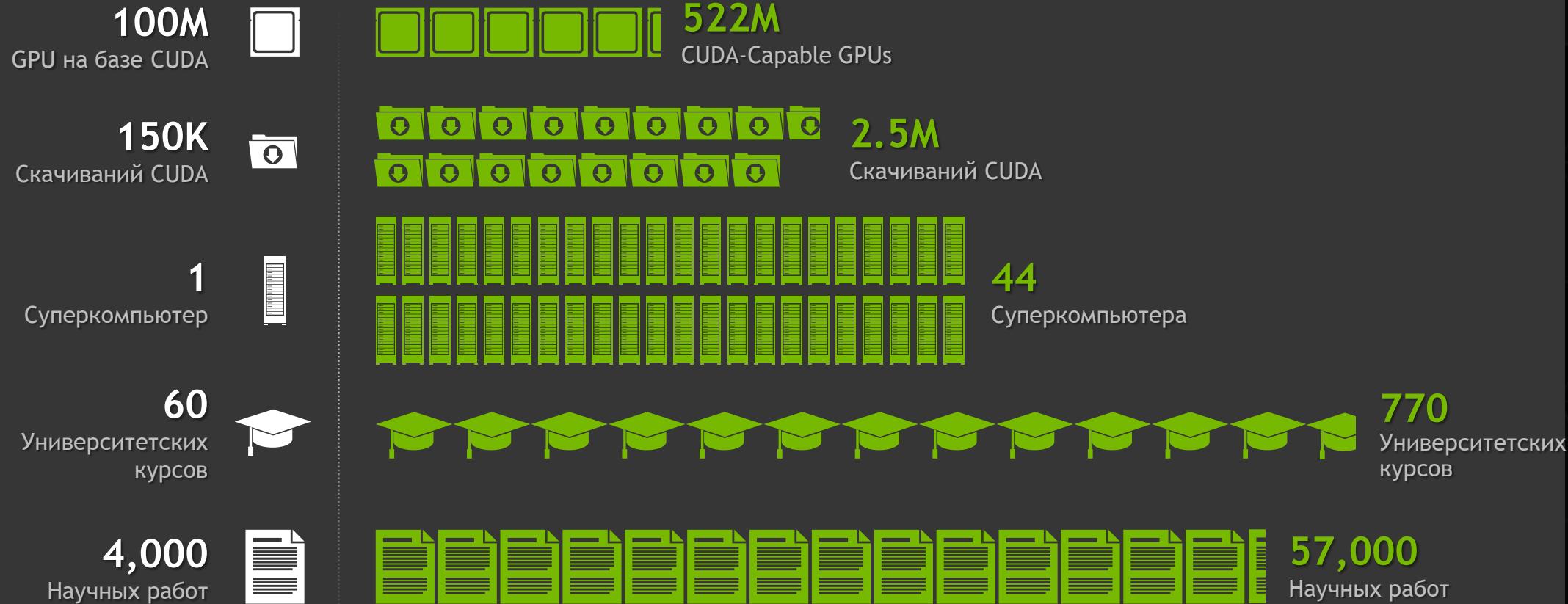


Платформа для разработчиков в
области компьютерного зрения,
робототехники и медицины

192 ядра · 326 GFLOPS
CUDA Enabled

Доступен сейчас

РОСТ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА GPU





Вычисления на GPU
от мобильных устройств до суперкомпьютеров