

## Tesla Bio Workbench позволяет ученым делать новые открытия в бионауках

*Новые, оптимизированные под GPU приложения, сайт сообщества и сконфигурированные системы на базе Tesla уже доступны ученым*

NVIDIA представляет систему **Tesla BIO Workbench**, которая позволяет ученым раздвинуть границы биологических исследований, превратив стандартный ПК в вычислительную лабораторию, способную обрабатывать сложные биологические коды в таких областях, как создание лекарств и определение последовательности DNA, со скоростью **в 10-20 раз быстрее** благодаря графическим процессорам NVIDIA® Tesla™.

Tesla Bio Workbench включает следующее:

- Набор оптимизированных под GPU бионаучных приложений для исследований в области молекулярной динамики и квантовой химии, включая **AMBER, GROMACS, LAMMPS, NAMD, TeraChem, VMD**, и приложений биоинформатики, таких, как **CUDASW++ (Smith-Waterman), GPU-HMMER и MUMmerGPU**.
- Сайт сообщества для загрузки новых приложений, проверки результатов тестов, чтения научных материалов и пособий, обсуждения на форумах с разработчиками приложений и многое другое - [http://www.nvidia.ru/page/pg\\_57781.html](http://www.nvidia.ru/page/pg_57781.html).
- Подробная информация по рабочим станциям и кластерам на базе Tesla GPU для быстрой и удобной установки данных приложений.

Традиционно ученые в области молекулярной динамики и квантовой химии проводят эксперименты в лабораториях, где соединяют вещества, изучают новые свойства и измеряют эффективность инноваций. Прогресс в вычислительной науке позволяет сегодня симулировать подобные эксперименты, однако для проведения подобных симуляций требуются мощные суперкомпьютеры с тысячами центральных процессоров (CPU).

Благодаря массивно-вычислительной архитектуре CUDA™ графических процессоров NVIDIA, сегодня такие приложения **можно ускорить в 10-20 раз** – это значит, что даже 1 ПК с GPU Tesla теперь может легко обогнать суперкомпьютер.

### Отзывы представителей науки

"Мы работаем над новой техникой на базе GPU в приложении для визуализации в области молекулярной динамики, которая изучает, как маленькие молекулы, такие, как кислород или CO<sub>2</sub>, мигрируют в белки. Эти исследования важны для изучения механизмов ферментативной реакции", - рассказывает Джон Стоун (John Stone), старший программист в Университете Иллинойса в Урбана-Кампейн. **"Симуляции, которые занимают один день на рабочей станции с GPU, раньше длились 30 дней на машине с CPU, что малоэффективно для настоящих исследований"**.

"TeraChem – это мощный пакет по молекулярному моделированию, с помощью которого можно просчитать состав новых лекарств, при этом не тратя время на синтез бесперспективных кандидатов", - отмечает Тодд Мартинез (Todd Martinez), профессор по физической и теоретической химии в

Стэнфордском Университете. **“С помощью TeraChem вычисления, раньше занимавшие несколько дней или даже недель на кластере, теперь быстро выполняются на рабочих станциях с GPU NVIDIA.** Это позволяет нам мгновенно проводить тщательную фильтрацию результатов и ускорять процесс создания лекарств”.

“Используя AMBER для симуляции гидролиза ферментов целлюлозы, Cellobiohydrolase-I, который является ключевым компонентом для повышения эффективности производства этанола, мы обнаружили, что **производительность одного GPU NVIDIA эквивалентна кластеру из 10 узлов**”, - отмечает Росс Уолкер (Ross Walker), профессор суперкомпьютерного центра Сан-Диего, UC San Diego.

"В нашем центре ученые используют GPU-приложения по молекулярной динамике NAMD, чтобы изучить, как клетки вирусов реагируют на разные вещества, включая изучение эффективности действия лекарств на вирус H1N1", - рассказывает Клаус Шултен (Klaus Schulten), профессор физики, директор службы NIH по молекулярному моделированию и биоинформатики и содиректор Центра NSF по физике живых клеток в Университете Иллинойса в Урбана-Кампейн. **“Приложение NAMD работает на рабочей станции с 4 GPU быстрее, чем в группе серверов с 16 CPU”.**

"Одна из приоритетных задач в молекулярных симуляциях – это автоматическая проверка лекарств. Мы традиционно использовали GROMACS для вычислений привязки лекарств к мембранным белкам на больших кластерах, но это дорогой и сложный способ”, - сказал Эрик Линдал (Erik Lindahl), адъюнкт-профессор в Центре Биомембранных Исследований в Стокгольмском Университете. **“Сейчас мы добавляем GPU, потому что один GPU в 4-5 раз быстрее CPU в большинстве обычных симуляций.** Мы думаем, что уже через несколько лет рабочие станции с несколькими картами займут большую часть рынка, и именно поэтому мы видим в компании NVIDIA очень важного партнера”.

#### **Полезные ссылки / Видео:**

Веб-ссылки:

[Сайт по Tesla Bio Workbench](#)

[Решения для высокопроизводительных вычислений на GPU](#)

Видео-ссылки:

[Росс Уолкер рассказывает про AMBER на GPU](#)

[Клаус Шултен рассказывает про вычисления, связанные с вирусом H1N1 на GPU](#)

[Университет Temple рассказывает о разработке новых шампуней в HOOMD](#)

[Джон Стоун рассказывает о VMD на GPU](#)

#### **О компании NVIDIA**

Компания NVIDIA (Nasdaq: NVDA) – лидер в области технологий программируемой графики и изобретатель GPU - высокопроизводительного процессора, который генерирует захватывающую интерактивную графику на рабочих станциях, персональных компьютерах, игровых приставках и мобильных устройствах. NVIDIA поставляет свои GeForce® GPU продукты на рынок развлечений и потребительский рынок, продукты Quadro GPU предназначены для рынка профессионального дизайна и визуализации, а компьютерные решения Tesla™ поставляются на рынок вычислений, требующих высокой производительности. Главный офис NVIDIA расположен в Санта-Клара, Калифорния, а филиалы компании находятся в Азии, Европе и Америке.

Отдельные заявления данного пресс-релиза, включая, но не ограничиваясь ими, упоминающие о преимуществах, особенностях, влиянии и возможностях Tesla Bio Workbench, процессоров NVIDIA Tesla и архитектуры CUDA, приводятся с расчетом на будущее и могут изменяться в результате обстоятельств и рисков, приводящих к результатам, материально отличным от ожидаемых. Такие обстоятельства и риски включают разработку более быстрой или эффективной технологии, использование CPU для параллельных вычислений, конструкторские, производственные или программные ошибки, влияние технологического развития и конкуренции, изменения в предпочтениях и требованиях покупателей, выбор других стандартов или продуктов конкурентов покупателями, изменения в стандартах отрасли и интерфейсах, неожиданное снижение производительности наших продуктов или технологий при интеграции в системы, а также другие риски, указываемые время от времени в отчетах, которые NVIDIA отсылает в Комиссию по ценным бумагам и биржевым операциям, включая отчет по форме 10-Q за финансовый период, закончившийся 25 октября 2009 года. Копии отчетов для SEC опубликованы на нашем сайте и доступны у NVIDIA бесплатно. Данные, относящиеся к будущему заявлению, не относятся к будущей производительности, а только к текущему моменту, и, кроме случаев, установленных законом, NVIDIA не несет ответственность за обновление таких заявлений, чтобы отразить будущие события или обстоятельства.

© Компания NVIDIA®, 2009. Все права защищены. NVIDIA, логотип NVIDIA, Tesla и CUDA являются товарными знаками и/или зарегистрированными товарными знаками компании NVIDIA в США и/или других странах. Все другие названия компаний и/или продуктов могут являться товарными знаками и/или зарегистрированными товарными знаками соответствующих владельцев. Функции, цены, наличие и спецификации могут быть изменены без предупреждения.