



CUDA® АЛЬМАНАХ  
ОКТЯБРЬ 2014





# СОДЕРЖАНИЕ

## НОВОСТИ NVIDIA CUDA

Встречи сообщества GPU Computing в Санкт-Петербурге 28 и 29 октября [3](#)

Новый уровень производительности с Java, системами POWER и NVIDIA GPU [4](#)

NVIDIA и IBM приносят супервычисления в мир Big Data [5](#)

Ежегодный грант в 150 000 \$ для университетов и разработчиков по всему миру [6](#)

Стань частью GTC 2015 [7](#)

## НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

Разработка интеллектуальной системы управления сложными объектами // Э.И. Самигулина [8](#)

Некоторый опыт применения NVIDIA OptiX // В. Дебелов [9](#)

Результаты исследований по проекту «Разработка моделей и информационной технологии прогнозирования параметров производственных процессов обогащения руд» // А.Г. Олейник, В.В. Бирюков, В.Ф. Скороходов, А.В. Щербаков [10](#)

Анализатор траекторий молекулярной динамики и его применение к изучению механических свойств белков // И. В. Лихачёв, А. В. Глякина, О. В. Галзитская, Н. К. Балабаев. [11](#)

**ПОЛЕЗНЫЕ РЕСУРСЫ ПО CUDA** [12](#)

**ВАКАНСИИ CUDA** [13](#)

**КОНТАКТЫ** [15](#)

# ВСТРЕЧИ СООБЩЕСТВА GPU COMPUTING В САНКТ-ПЕТЕРБУРГЕ 28 И 29 ОКТЯБРЯ

Приглашаем вас посетить встречи сообщества CUDA Разработчиков в Санкт-Петербурге:

28 октября (вторник)

19:00

**Митап, посвященный Deep Learning**

Регистрация: <http://www.meetup.com/Deep-Learning-Meetup/events/211158052/>

29 октября (среда)

19:00

**GPU Computing Митап**

Регистрация: <http://www.meetup.com/St-Petersburg-GPU-Meetup/events/213982732/>

## НОВЫЙ УРОВЕНЬ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ С JAVA, СИСТЕМАМИ POWER И NVIDIA

Экосистема Java – ведущая платформа для разработки корпоративного программного обеспечения, которая широко используется на таких платформах, как семейство продуктов IBM WebSphere Application Server. Java предлагает производительный, объектно-ориентированный язык программирования с большой экосистемой разработчиков и удобные для разработчика функции, такие как автоматизированное управление памятью, безопасность программирования, портативность среды исполнения, а также высокопроизводительную оперативную (JIT) компиляцию.

Разработчики Java-приложений сталкиваются с задачами, сложность которых постоянно растет. Им приходится иметь дело с анализом больших объемов данных, что требует нового уровня производительности. Большие объемы данных усложняют проблему, так как сотни гигабайт информации в подобных приложениях являются нормой, а для их анализа требуются более высокие вычислительные скорости. Платформа Java развивается за счет поддержки более простого параллельного программирования с помощью Fork/Join Framework и набора API. Совсем недавно в Java 8 была добавлена поддержка лямбда-выражений, которые упрощают создание высоко параллельных приложений.

Новый сервер IBM Power S824L – это высокопроизводительное решение для обработки данных, созданное на платформе ускоренных вычислений на NVIDIA Tesla (Tesla GPU и обеспечивающее программное обеспечение) с процессором IBM POWER8.

Отделение IBM POWER сотрудничает с NVIDIA, чтобы сделать GPU доступными на высокопроизводительных серверных платформах, что сулит новый уровень параллельной производительности Java-приложений. Мы решили добавить в Java поддержку GPU, шаг за шагом используя три метода.

[ЧИТАТЬ ПОДРОБНЕЕ](#)

# NVIDIA И IBM ПРИНОСЯТ СУПЕРВЫЧИСЛЕНИЯ В МИР BIG DATA

Компании NVIDIA и IBM объединяют усилия в работе над самыми сложными задачами, одной из которых является организация ресурсоемких вычислений в центрах обработки данных.

На днях IBM объявила о разработке новой GPU-ускоренной версии базы данных IBM DB2 с поддержкой BLU Acceleration. Программный продукт DB2 используется компаниями по всему миру для работы с большими объемами данных. В будущем специалисты IBM планируют добавить GPU-ускорение и в другие программы для работы с Big Data.

Также компания IBM оптимизирует популярные приложения с GPU-ускорением для работы на системах IBM Power. Области применения приложений, над которыми ведется работа, включают биоинформатику, оборону, финансы, молекулярную динамику и моделирование погоды. Среди продуктов, над которыми ведется работа, - SOAP3, NAMD, GROMACS, библиотека FFTW и Quantum Espresso. Все эти приложения смогут получить преимущество от использования первых в мире систем OpenPower с GPU-ускорением.

## IBM Power теперь с GPU-ускорением

Кроме того, IBM представила новую систему IBM Power S824L. Это мощная станция для обработки данных, объединяющая ускоряющую вычисления платформу NVIDIA Tesla на базе Tesla GPU и специализированное ПО с процессором IBM POWER8.



Новая система является первым результатом непрерывной работы NVIDIA и IBM, в рамках которой компании объединяют свои решения в области процессоров, систем для центров обработки данных, ускорителей, системного программного обеспечения и приложений в целях создания оптимизированных продуктов для решения чрезвычайно сложных задач.

В будущие системы IBM POWER будет интегрирован высокоскоростной интерфейс NVIDIA NVLink, первое в мире решение для высокоскоростного соединения CPU и GPU. Данное решение позволит отказаться от обмена данными между CPU и GPU через интерфейс PCI Express.

NVLink позволяет передавать данные между GPU и центральным процессором IBM POWER от пяти до 12 раз быстрее, чем используемые сегодня решения. Новый подход позволит улучшить производительность многих корпоративных приложений и приложений для интенсивных вычислений, а также приблизит нас к вычислениям экзафлопсного уровня.

В ближайшие месяцы вы узнаете больше о результатах совместной работы NVIDIA, IBM и других участников сообщества OpenPOWER, которые расскажут о новых прорывах в работе над вычислительными архитектурами.

## ЕЖЕГОДНЫЙ ГРАНТ В 150 000 \$ ДЛЯ УНИВЕРСИТЕТОВ И РАЗРАБОТЧИКОВ ПО ВСЕМУ МИРУ

На GTC NVIDIA представила Глобальную премию – ежегодный грант в размере 150 000 долларов для поддержки инноваций в области «Социальные и гуманитарные проблемы мира». Получить эту сумму может университет или независимый разработчик, использующий технологии NVIDIA для достижения важных результатов в областях: исследование заболеваний, разработка лекарств и развитие медицинской визуализации, энергоэффективность, реагирование на стихийные бедствия, кибер-безопасность и др. Принять участие в программе могут университеты, разработчики и некоммерческие организации со всего мира. Технологии NVIDIA должны играть существенную роль в проекте. Также будут рассмотрены несколько проектов из одного и того же университета или организации.

[Подать заявку и узнать подробнее о программе](#)



## СТАНЬ ЧАСТЬЮ GTC 2015

У вас есть возможность принять участие в GPU Technology Conference 2015, 17-20 марта 2015 года в Силиконовой Долине США.

Участники из более 50 стран мира приедут на Конференцию по GPU-технологиям, чтобы узнать о потрясающих возможностях параллельных вычислений.

Посетите данное мероприятие вместе с другими учеными, разработчиками, графическими художниками, конструкторами, исследователями, инженерами и IT-менеджерами, чтобы:

- Рассказать о своем научном проекте
- Получить информацию о передовых инновациях
- Узнать о значительных успехах использования GPU
- Поучиться у профессионалов в области параллельных вычислений и визуализации
- Познакомиться с коллегами и экспертами в отрасли

[ПОДАТЬ ЗАЯВКУ НА УЧАСТИЕ](#)

# НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

## РАЗРАБОТКА ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ СЛОЖНЫМИ ОБЪЕКТАМИ.

Самигулина Зарина Ильдусовна

Основные направления современного мирового научного прогресса и их актуальность определяются исследованиями и разработками в области Искусственного интеллекта, Интеллектуальных систем и компьютерных технологий. Бурное развитие, в последнее время, интеллектуальных технологий в различных прикладных областях, и их реальное применение во многих сферах человеческой деятельности предъявляет высокие требования к качеству разрабатываемых интеллектуальных систем (ИС), которые должны надежно работать в условиях неопределенности параметров и обладать адаптационными возможностями. Существует множество различных ИС: для прогнозирования и управления сложными динамическими объектами, поддержки и принятия решений, в автоматизации проектирования, анализе многомерных данных, диагностике, для компьютерной безопасности, при прогнозировании природных и техногенных катастроф, прогнозировании рисков крупных инновационных проектов, при компьютерном молекулярном дизайне лекарственных препаратов и т.д. В работе предложена интеллектуальная технология управления сложными объектами, которая позволяет построить современную систему управления для

технических и технологических объектов с использованием промышленного оборудования и новейших технологий искусственного интеллекта.

В настоящее время остро стоит вопрос об эффективном управлении реальными сложными системами на основе обработки огромного потока данных. В большинстве случаев, из-за динамического характера протекания процесса и возникающих неопределенностей параметров прогнозирование поведения объекта затруднено. Необходимо учитывать, что некоторые факторы, не играющие ключевую роль в текущий момент времени, позже могут оказывать существенное влияние на процесс. Для решения данных проблем лучше подходят современные методы искусственного интеллекта, такие как: нейронные сети, генетические алгоритмы, нечеткие системы, экспертные системы, клеточные автоматы, деревья решений, роевой интеллект, искусственные иммунные системы (ИИС) и т.д. В связи с этим, актуальна разработка систем, обладающих высокой степенью автономности, адаптивности, надежности и способностью работать в условиях неопределенности. [ПОДРОБНЕЕ](#)



# НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

## НЕКОТОРЫЙ ОПЫТ ПРИМЕНЕНИЯ NVIDIA OPTIX.

В. Дебелов

Достаточно много научно-исследовательских программ разрабатывается для проведения численных экспериментов во время отладки и получения различных характеристик разрабатываемого алгоритма. Во многих случаях алгоритм последовательный, но для качественной проверки требуется получить некоторую целостную картину, просчитывая его для ряда связанных наборов параметров. В нашей области знаний алгоритм работает для серии пикселей.

Простой прямолинейный подход – просчитать алгоритм для всех пикселей последовательно – приводит к длительному затягиванию времени проведения экспериментов, особенно при наличии рекурсии. Часто применяется MPI, но для реального получения выгоды во времени счета требуется наличие подручного кластера. В последнее время стало модно программировать параллельные приложения, используя технологию CUDA, а значит:

- Надо изучить технологию. Знать архитектуру ГПУ. Очень времязатратный процесс. Или приглашать программиста, которому надо будет объяснить суть алгоритма в некотором объеме.
- Имеющийся код на C/C++ необходимо значительно переделать.
- По окончании экспериментов код на CUDA становится ненужным. Также, скорее всего, этот код не подойдет для GPU других производителей.

В принципе, подход напоминает переход с языка высокого уровня на более низкий уровень, что, как правило, ведет к уменьшению производительности труда исследователя, хотя может

дать значительный выигрыш в производительности программы.

В последнее время (с 2008 г.) Nvidia популяризирует технологию OptiX, построенную над CUDA для создания параллельных программ для приложений, основанных на трассировке лучей:

- Хотя OptiX построена над CUDA, программист не обязан знать CUDA. Однако для знатоков CUDA, OpenGL и DirectX возможно применение их знаний для построения более эффективных программ.
  - Программист должен немного перестроить свои модули на C или C++ при переходе на OptiX. В основном это касается косметических изменений при передаче параметров и организации основного цикла.
  - Очень полезная черта: исходные коды переносимы между Windows и Linux платформами.
  - Большой набор примеров приложений в исходных кодах, например, алгоритмы Виттеда, Кука.
  - Для Windows обеспечивается автоматизация компиляции и сборки программ в рамках Visual Studio 2010. Для Visual Studio 2012 создан wizard приложений в среде OptiX.
- Отрицательной стороной OptiX на современном этапе является ориентация на float, а не на double. Использование последних потребует определенных усилий. В данной работе не приводится описание OptiX в какой-либо сокращенной форме, а просто показано, как применение механизма ускорения сказывается на времени работы программы.

[ПОДРОБНЕЕ](#)

# НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

## РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ ПО ПРОЕКТУ «РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ И ИНФОРМАЦИОННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПРОЦЕССОВ ОБОГАЩЕНИЯ РУД»

А.Г. Олейник, В.В. Бирюков, В.Ф. Скороходов, А.В. Щербаков

Добыча и переработка минеральных полезных ископаемых остается ключевой отраслью экономики, как Мурманской области, так и ряда других «сырьевых» регионов Российской Федерации. С учетом возрастающей конкуренции и нестабильности мировых рынков важной задачей обогатительного производства является обеспечение высокой эффективности извлечения полезных компонентов, снижение отходов и потерь. Несмотря на то, что задачи совершенствования аппаратов и процессов обогащения руд много лет исследуются и решаются и в Кольском научном центре РАН, и в других научных организациях, как в России, так и за рубежом, они сохраняют свою актуальность. Это обусловлено целым рядом причин различной природы.

Принципиально новые возможности получения эмпирической информации об обогатительных процессах открываются с внедрением на обогатительных предприятиях автоматизированных систем оперативного диспетчерского управления и сбора данных (Supervisory Control And Data Acquisition – SCADA-систем). Именно на использовании данных оперативного

мониторинга производственных процессов обогащения основана технология их оперативного прогнозирования, разработанная в рамках рассматриваемого проекта. Основной аспект новизны описываемой технологии заключается в интеграции созданных авторами моделей и средств компьютерного моделирования инженерных задач с действующими на промышленных предприятиях SCADA-системами с целью расширения их функциональных возможностей адаптивными средствами оперативного прогнозирования.

В рамках проекта проведены исследования по оценке соответствия реальных характеристик системы на основе GPU CUDA NVIDIA Tesla C2050 характеристикам, заявленным производителем. Исследовалась также производительность указанной системы по сравнению с системами, использующими только серийный центральный процессор.

[ПОДРОБНЕЕ](#)

# НАУЧНЫЕ РАБОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛЕНИЙ НА CUDA

## АНАЛИЗАТОР ТРАЕКТОРИЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ К ИЗУЧЕНИЮ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ БЕЛКОВ

И. В. Лихачёв, А. В. Глякина, О. В. Галзитская, Н. К. Балабаев.

Методом моделирования молекулярной динамики (МД) пользуются во многих научно-исследовательских лабораториях. После проведения МД-расчетов ставится задача анализа полученных данных. Возможны случаи, когда необходимо ответить на конкретные вопросы по полученным результатам, а также когда возникает потребность описать эксперимент в целом, заострив внимание на структурные перестроения в ходе моделирования.

Как правило, при анализе траекторий многие исследователи пишут собственные несложные программы для расчета простых характеристик. Вместе с тем, сложные алгоритмы работы с траекториями заложены в такие объемные пакеты как VMD и GROMACS, на изучение которых требуется до полугода рабочего времени. Разработанная программа TAMD (Trajectory Analyzer of Molecular Dynamics, далее по тексту Анализатор) сочетает в себе: интуитивный графический пользовательский интерфейс, новые характеристики, направленные на быстрый анализ траектории в целом, а также является платформой для написания новых характеристик на траекториях и управляемой программой-платформой с

интерпретатором скриптового языка для автоматизации рутинных действий.

В целях повышения быстродействия для анализа МД-систем из большого количества атомов, реализация Анализатора траекторий использует современные технологии, направленные на ускорение обработки информации, такие как технология вывода трехмерной графики OpenGL, параллельное программирование, в том числе массивно-параллельное (технология CUDA).

Некоторые белки в клетке испытывают механические деформации при таких биологических процессах как межклеточная адгезия, сокращение мышц, перенос белков через мембрану. Для понимания молекулярной природы механической стабильности белков необходимо провести большое количество МД опытов для исследования зависимости механических свойств белков от различных параметров. Исследование этого вопроса представляет практический интерес для конструирования биоматериалов с повышенной механической стабильностью. При помощи Анализатора проведен анализ механического разворачивания по траекториям МД белка межклеточной адгезии кадгерина, а также влияние хиральности восьми альфа-спиральных белков на их механические свойства. [ПОДРОБНЕЕ](#)



# ПОЛЕЗНЫЕ РЕСУРСЫ ПО CUDA

## Форум Разработчиков NVIDIA

Присоединяйтесь к Форуму CUDA-разработчиков, делитесь своим опытом и узнавайте много нового. <http://devtalk.nvidia.com/>

## Документация по CUDA

Со списком документации по CUDA можно ознакомиться [здесь](#).

## Обучение онлайн

[Udacity](#) | [Coursera](#) | [Курс на русском языке](#)

## Библиотеки с поддержкой GPU ускорения

Список библиотек с поддержкой GPU ускорения от NVIDIA и партнеров.

<https://developer.nvidia.com/gpu-accelerated-libraries>

## GPU Тест-Драйв

Хотите бесплатно протестировать Tesla K40? Зарегистрируйтесь [здесь](#).

## Ускоряйте научные приложения с OpenACC

Протестируйте компилятор PGI OpenACC бесплатно в течение месяца. [Подробнее](#).

## Приложения, ускоряемые на GPU

Ознакомьтесь со списком из более 270 приложений [можно на сайте](#).

## Книги, посвященные CUDA и вычислениям на GPU

Со списком книг, посвященных CUDA и вычислениям на GPU, можно ознакомиться [здесь](#).

## Скачайте

CUDA <http://developer.nvidia.com/cuda-downloads>

Nsight <http://www.nvidia.com/object/nsight.html>

## ВАКАНСИИ CUDA

### Специалист по развитию технологий (мобильная платформа)

NVIDIA

Москва

Мы ищем первоклассного инженера для работы в команде поддержки разработчиков мобильной платформы Tegra. В обязанности будет входить помощь сторонним разработчикам в оптимизации приложений (в основном, игровых) для мобильной платформы Tegra, обеспечение оптимальной производительности, портирование, написание технических демонстраций и участие в конференциях. Возможны редкие командировки за рубеж.

#### Требования:

- Отличное знание C++
- Отличные знания в области математики
- Опыт использования графических библиотек DirectX или OpenGL
- Опыт написания и оптимизации шейдеров GLSL/HLSL/CG
- Опыт портирования приложений
- Опыт профилирования приложений
- Опыт работы с Android как плюс
- Опыт написания бенчмарков как плюс
- Опыт работы с CUDA как плюс
- Разговорный английский язык

[ПОДРОБНЕЕ](#)

# ВАКАНСИИ CUDA

## Программист C#

ЗАО НПФ ИнфоСистем-35

Москва

ЗАО “НПФ “ИнфоСистем-35” является одной из ведущих фирм по созданию информационно-управляющих систем для космических комплексов оборонного и гражданского назначения.

### Обязанности:

- Разработка программных комплексов планирования и управления спутниками ДЗЗ;
- Обработка цифровых космических фото- и радиолокационных изображений.

### Требования:

- Навыки по разработке программного обеспечения на языках C#/Visual C++;
- Высшее или незаконченное высшее (старший курс) техническое образование;
- Знание английского языка (чтение документации);
- Хорошее знание математики;
- Знание принципов ООП;
- Приветствуется знание технологий: .Net, WinForms, WPF, WCF, CUDA, TPL, СУБД

### PostgreSQL/Informix;

- Общие требования:
  - o Ответственность;
  - o Коммуникабельность, умение и желание работать в команде;
  - o Стремление к профессиональному росту.

### Условия:

- Жители Москвы и МО;
- Работа в молодом дружном коллективе;
- График работы: полный день или гибкий график для студентов;
- Работа в офисе, расположенном в 7 мин. от станции м. Алексеевская.

[ПОДРОБНЕЕ](#)



## КОНТАКТЫ

Если вы хотите, чтобы ваша статья появилась в следующем выпуске CUDA Альманах пишите нам на:

Лидия Андреева  
[landreeva@nvidia.com](mailto:landreeva@nvidia.com)

По вопросам приобретения NVIDIA GPU и по прочим техническим вопросам пишите нам на:

Антон Джораев  
[adzhoraev@nvidia.com](mailto:adzhoraev@nvidia.com)