

Графические процессоры – биологии

24–25 мая 2010 г. на биологическом факультете Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова состоялась научно-практическая конференция-совещание «**Вычисления с использованием графических процессоров в биологии и биоинформатике**».

На открытии конференции выступили декан биологического факультета МГУ академик Михаил Петрович Кирпичников и проректор МГУ академик Алексей Ремович Хохлов. Оба они отметили важность информационных технологий и математического моделирования для современной биологии и необходимость использования больших вычислительных ресурсов для решения реальных задач современной молекулярной и клеточной биологии, генетики, биофизики и биохимии, биотехнологии. Именно этими потребностями вызван повышенный интерес биологов к графическим процессорам (GPU), дающим возможности эффективных параллельных вычислений, в десятки и сотни раз по скорости превосходящим возможности персональных компьютеров, но гораздо более дешевым, чем суперкомпьютеры. По сути дела графические процессоры могут открыть новую эру – «персональных суперкомпьютеров».

Целью совещания был обмен опытом, установление деловых контактов, создание сетевого ресурса и постоянно действующего пула заинтересованных пользователей и разработчиков по применению графических сопроцессоров для молекулярного моделирования, решения задач биоинформатики, математической физики, распознавания изображений и смежным вопросам.

Использование графических сопроцессоров позволяет для ряда задач резко поднять производительность компьютеров (до нескольких ТФлоп/с), сохраняя компактность оборудования и его относительно невысокую стоимость. Это обстоятельство вызывает большой интерес и стремление к созданию алгоритмов и программных продуктов, приспособленных к использованию массивно параллельных вычислений на графических сопроцессорах.

Конференция включила 3 сессии: технология и вычислительные методы, GPU в постгеномных технологиях, моделирование (устные и стендовые сообщения), а также круглый стол на тему «Опыт организации сетевых экспертных сообществ».

В совещании приняли участие представители от производителей графических процессоров и гибридных решений. Выступили представители фирмы изготовителя NVIDIA: генеральный директор подразделения Tesla Andy Keane и Антон Романович Джораев, краткий материал которого мы публикуем в этом номере.

Авторы нескольких десятков сообщений об использовании графических процессоров для конкретных задач биоинформатики и молекулярной динамики отмечали, что применение GPU позволяет сократить время вычислений в десятки и сотни раз. Основной проблемой является необходимость перепрограммирования задач для GPU. Частично эту задачу решает фирма NVIDIA, разработавшая силами своих программистов программно-аппаратную платформу «CUDA», позволяющую запускать произвольный код на GPU.

Уже существуют GPU-версии широко используемые для задач биоинформатики, квантовой химии и молекулярной динамики программных пакетов. Более подробная информация представлена в публикуемой нами статье Антона Джораева.

*Профессор кафедры биофизики биологического факультета
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова,
доктор физико-математических наук*

Г. Ю. Ризниченко