

AMBER 11 activé par GPU met un supercalculateur de bureau au service des bio-scientifiques.

Les scientifiques travaillant sur la découverte de médicaments ont constaté des performances informatiques multipliées par 100.

SANTA CLARA, Calif. -- 29 avril 2010 -- La recherche scientifique concernant la découverte de médicaments prend énormément de temps. Cette recherche peut être accélérée avec le lancement d'AMBER 11, outil logiciel qui permet aux bio-scientifiques de s'adjoindre la puissance d'un supercalculateur sur leur PC de bureau.

AMBER 11, dernière version d'une des applications les plus souvent utilisées par les biochimistes et autres spécialistes impliqués dans la recherche de la dynamique moléculaire, est optimisé pour tourner sur des processeurs graphiques (GPU) NVIDIA®, qui multiplie par 100 la vitesse de l'outil par rapport à un serveur basé sur un CPU. Les GPU apportent sur une station de travail des performances qui sont équivalentes à celles d'un supercalculateur, améliorant ainsi la productivité car les scientifiques n'ont plus à attendre pour travailler sur un supercalculateur partagé ou sur la grappe de serveurs d'un département.

"La ressource supercalculateur que nous utilisons est constamment embouteillée, et nous devons attendre un jour voire plusieurs jours pour faire tourner une simulation, allongeant nos projets de plusieurs semaines", a déclaré Dr Ross Walker, professeur de recherche au San Diego Supercomputer Center de l'Université de Californie, San Diego et principal contributeur à AMBER.

AMBER 11 est conçu pour tirer parti des GPU NVIDIA Tesla 20 qui utilisent l'architecture massivement parallèle CUDA pour les besoins spécifiques des applications HPC. Au cours des premiers essais effectués par la communauté des utilisateurs AMBER, le Dr Walker a reçu plus d'une douzaine de rapports montrant une accélération multipliée par plus de 30 fois sur une variété de simulations bio-moléculaires.

"Avec les GPU, nous pouvons réaliser la plupart de nos travaux sur le PC et cela change tout. N'importe quel département de recherche cherchant à investir dans des ressources informatiques pour faire tourner AMBER devrait commencer par équiper chaque chercheur d'une station de travail doté de GPU", a ajouté le Dr Walker.

Le Dr Walker a remarqué qu'un seul GPU Tesla fournit autant de puissance de traitement qu'un cluster hautes performances de 512 coeurs CPU en simulant une nanoseconde de la durée de vie d'un nucléosome en solvant implicite de 25 000 atomes. Dans une simulation de solvant explicite simplifiée, comme le test JAC, le docteur a remarqué qu'un GPU Tesla fournit la puissance de traitement équivalente à 48 coeurs du supercalculateur NSF Ranger.

"Les augmentations des ordres de grandeur des performances permettent de nouvelles découvertes et le travail que nous avons fait avec le Dr Walker en fait partie", a déclaré Andrew Cresci, general manager du marketing chez NVIDIA. "Grâce à AMBER 11, les scientifiques peuvent désormais tester beaucoup de théories et simuler plusieurs scénarios différents grâce à la vitesse apportée par les GPU et, plus important encore, la facilité d'accès aux stations GPU".

Plus d'informations sur AMBER 11, cliquez sur le lien : <http://ambermd.org/gpus/>. Plus d'informations sur Tesla Bio Workbench de NVIDIA, l'initiative de NVIDIA dans laquelle AMBER est un composant permettant aux bio-physiciens et chimistes de repousser les frontières de la recherche biochimique grâce à l'utilisation des GPU, cliquez sur le lien : http://www.nvidia.com/object/tesla_bio_workbench.html

A propos de NVIDIA

NVIDIA a secoué le monde de la puissance graphique en inventant le processeur graphique (GPU) en 1999. Depuis, NVIDIA a constamment établi de nouveaux standards dans

l'informatique visuelle avec des traitements graphiques interactifs époustouflants disponibles sur toutes sortes d'appareils tels que les lecteurs multimédia portables, les PC portables et les stations de travail. L'expertise de NVIDIA dans les GPU programmables a conduit à des innovations dans le traitement parallèle pour faire d'un supercalculateur une machine peu coûteuse et largement accessible. La société possède plus de 1100 brevets américains, dont certains couvrant la conception et les idées fondamentales pour l'informatique moderne. Plus d'informations sur : www.nvidia.fr.