

エヌビディア合同会社 スポンサーセッション 「GPUによる創薬・ライフサイエンスへの貢献」

医薬品開発では一つの新薬に 1000 億とも 2000 億とも言われる莫大な費用と 10 年以上の開発期間を要すると言われており、従来よりコンピューターシミュレーションによる開発効率化が求められています。また近年は AI の活用に注目が集まっており、画像認識や音声認識を中心に有用性が認められているディープラーニング手法に期待が高まっています。

NVIDIAは2006年にGPUを汎用計算に活用する「GPUコンピューティング」の枠組みとしてCUDAを発表しました。これにより各種分野でGPUを活用した演算の高速化の取り組みが本格化し、今日では数百種類のアプリケーションがGPUによる高速化に対応しています。さらに近年はGPUによるディープラーニング手法が急速に重要性を増し、画像認識や音声認識を皮切りに様々な分野で革新的な成果を上げ、創薬・ライフサイエンス分野の研究も始まっています。

本セッションではまずNVIDIAのGPUコンピューティングとディープラーニング向けの最新環境をご紹介しますとともに、NVIDIAが重要分野と位置付けているライフサイエンス分野での活用事例や動向をご紹介します。さらに2008年に世界に先駆けてGPUをスーパーコンピューターに導入して活用を続けられている東京工業大学より、関嶋政和先生と秋山泰先生にご登壇頂き、創薬・ライフサイエンス分野における大規模GPU環境活用の最前線についてご講演頂きます。

プログラム:

「NVIDIA GPU ディープラーニング環境のご紹介とライフサイエンス分野への取り組み」

山田泰永 エヌビディア合同会社 エンタープライズ事業部 ライフサイエンス領域マネージャー

「スマート創薬に期待されるGPUによる高速化」

関嶋政和 東京工業大学 科学技術創成研究院 スマート創薬研究ユニット ユニット長・准教授

「中分子IT創薬およびメタゲノム解析における大規模GPU計算の活用」

秋山 泰 東京工業大学 情報理工学院 教授



システム仕様

GPU	8x Tesla V100	8x Tesla P100
演算性能 (GPU FP16)	960 TFLOPS	170 TFLOPS
GPU メモリ	128 GB (GPU 8 基の合計)	
Tensor コア	5,120	N/A
CUDA コア	40,960	28,672
CPU	2x Intel Xeon E5-2698 v4 2.2 GHz (計 40 コア)	
システムメモリ	512 GB DDR4	
ストレージ	Data: 3x 1.92 TB SSD RAID 0 OS: 1x 1.92 TB SSD	
ネットワーク	2x 10 GbE, 4x InfiniBand EDR	
ソフトウェア	Ubuntu Linux OS DGX 推奨 GPU ドライバ CUDA Toolkit	

NVIDIA DGX -1

NVIDIA Tesla V100 搭載サーバーとワークステーション

NVIDIA DGX Station

システム仕様

GPU	4x Tesla V100
演算性能	30 TFLOPS (GPU FP64) 60 TFLOPS (GPU FP32) 480 Tensor TFLOPS (GPU FP16)
GPU メモリ	64 GB (GPU 4 基の合計)
Tensor コア	2,560
CUDA コア	20,480
CPU	Intel Xeon E5-2698 v4 2.2 GHz (20 コア)
システムメモリ	256 GB DDR4
ストレージ	Data: 3x 1.92 TB SSD RAID 0 OS: 1x 1.92 TB SSD
ネットワーク	2x 10 GbE
ディスプレイ	3x DisplayPort, 4K 解像度
ソフトウェア	Ubuntu Desktop Linux OS DGX 推奨 GPU ドライバ CUDA Toolkit



詳細はこちらをご覧ください : <https://www.nvidia.com/ja-jp/data-center/dgx-systems/>

© 2017 NVIDIA Corporation. All rights reserved. NVIDIA, the NVIDIA logo, and Inray are trademarks and/or registered trademarks of NVIDIA Corporation. All company and product names are trademarks or registered trademarks of the respective owners with which they are associated.

