

# GDEPアドバンス・エヌビディア ランチョンセミナー 「GPU/AI創薬の進展と最新情報」

近年非常に注目を集め大きな進展を遂げているディープラーニングAIにおいて、NVIDIAのGPU環境はその圧倒的な高速計算性能と充実した開発環境から、様々な分野で標準的な環境として普及が続いています。

NVIDIAは研究開発の共通基盤として「GPUの計算力で困難な課題解決に貢献する」ことを目指し、ハードウェアだけではなくクラウドでもオンプレミスでも、誰でもすぐにディープラーニング・フレームワークや分子動力学シミュレーションアプリケーションをコンテナイメージとして導入するためのレポジトリ「NGC」を幅広く提供しています。

<https://www.nvidia.com/ja-jp/gpu-cloud/>

創薬分野では様々なディープラーニング/AI手法の活用に加えて、分子動力学(MD)シミュレーションでもGPUにより従来比数倍~数十倍の高速化が実現し、効率的な化合物の結合自由エネルギー計算などへの実応用が進んでいます。

またクライオ電顕によるタンパク質立体構造解析、ゲノム二次解析を始め、細胞画像解析や実験動物の行動解析など創薬周辺のライフサイエンス領域でも、計算能力がボトルネックになっている処理を数十倍に高速化することが可能になっています。

本ランチョンセミナーでは2名の先生方にご登壇頂き、GPU/AIを有効活用した最新で具体的な創薬手法や研究の最前線についてご紹介頂きます

## プログラム:

### 「MDトラジェクトリ解析への機械学習アプローチ (および二次構造予測への深層学習の応用)」

種石慶 理化学研究所 光量子工学センター / TXP Medical株式会社  
研究員

### 「深層学習を用いたタンパク質 - リガンド結合予測手法の開発」

メディシナルケミストによる標的蛋白質-リガンド結合構造の目視評価を深層学習で置き換える手法

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  
リーダー/准教授

# NVIDIA® DGX™ SYSTEMS

NVIDIA® Tesla V100 GPU 搭載ディープラーニングシステム



NVIDIA®

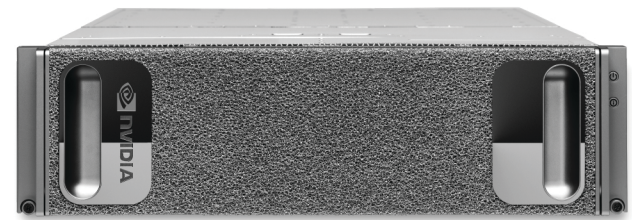


## NVIDIA DGX-1 ▶

GPU	8x Tesla V100 SXM2 (32GB)
演算性能	1 Peta Tensor FLOPS (GPU FP16)
GPU メモリ	256 GB (GPU 8 基の合計)
CPU	2 x Intel Xeon E5-2698 v4 2.2 GHz
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

## ◀ NVIDIA DGX-2

GPU	16x Tesla V100 SXM2 (32GB)
演算性能	2 Peta Tensor FLOPS (GPU FP16)
GPU メモリ	556 GB (GPU 8 基の合計)
CPU	2 x Intel Xeon Platinum 8168
システムメモリ	512 GB DDR4
ストレージ	OS: 2x 960GB NVME SSD 内部ストレージ: 30 TB (8x 3.84TB) NVME SSD
ネットワーク	2x 10 GbE, 4x InfiniBand EDR



## ◀ NVIDIA DGX Station

GPU	4x Tesla V100 SXM2 (32GB)
演算性能	500 Tensor TFLOPS (GPU FP16)
GPU メモリ	128 GB (GPU 8 基の合計)
CPU	Intel Xeon E5-2698 v4 2.2 GHz
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, 4K 解像度

NVIDIA Advanced Technology Program (ATP) パートナー



www.gdep.jp

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

© 2018 NVIDIA Corporation. All rights reserved. NVIDIA, the NVIDIA logo, and Iray 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.