

CBI 学会 2022 年大会 スポンサーセッション SS-03
2022 年 10 月 25 日 15:30 – 17:00 会場: 「平安」

AI 創薬・生命科学関連技術の進展とそれを支える GPU ソリューション

近年の計算/AI 創薬の進展にはシミュレーションと AI 学習/推論の両面で大規模な計算環境が必須であり、これまでも当社の GPU ハードウェアと関連ソフトウェアは縁の下の力持ちとして、これらの計算需要を支えてきました。

ハードウェア面では、本年発表した「H100 GPU」にて AI に適した 8 ビット浮動小数点計算性能で最大 4 ペタ FLOPS の性能を実現し、さらに AI モデルの精度を保ちながらこの低精度演算を有効活用するためのハード/ソフト連携機構である Transformer Engine も搭載しています。

ソフトウェア面では従来からポータルサイト「NVIDIA NGC」にて、GPU に最適化された各種ディープラーニングフレームワークのコンテナ、GROMACS や RELION 等の HPC アプリケーションのコンテナ、さらに様々な学習済 AI モデルも無償公開しています。

現在は特に AlphaFold2 でも活用されている Transformer を基盤とした、大規模自然言語モデルの創薬・生命科学領域への適用が非常に注目されており、当社では「OpenFold」「ESM-1」「ProtT5」といったタンパク質を対象としたモデルと、化合物を対象にした「MegaMolBart」モデルを搭載した「BioNemo フレームワーク」の限定公開を開始するとともに、どなたでも手軽にクラウド API 経由でこれらのモデルの推論が行えるマネージドサービス「BioNemo サービス」も展開予定となっています。

本セッションでは上記を含む AI 創薬・生命科学に役立つ GPU 関連情報、最新情報をお届けするとともに、第一線で研究に携わるゲストスピーカーから、最新動向についてじっくりとご講演頂きます。

ゲストスピーカー:

東京工業大学 情報理工学院 情報工学系 准教授
大上雅史 先生

[講演概要]

AlphaFold2 の登場から 1 年が経った。世間を沸かせた AI によるタンパク質立体構造予測技術は、今ではあたりまえのように生命科学や創薬分野の研究開発に活用されている。自然言語処理分野で発展した基盤モデルによる AlphaFold2 を超える構造予測 AI の展開など、白熱する創薬・生命科学分野の AI 研究の一端を紹介したい。



NVIDIA DGX H100

AI インフラの金字塔

人工知能 (AI) はビジネスにおける困難な課題を解決するための有力な手段になりました。顧客サービスの向上、サプライチェーンの最適化、ビジネス上の知見や洞察の獲得、ほぼすべての業界における最先端の製品やサービスの設計など、AI は組織にイノベーションを実現するための仕組みを提供します。AI インフラの先駆者となった NVIDIA DGX™ システムは、このような重要な概念を実現するための最も強力なプラットフォームを提供します。

NVIDIA DGX H100 はビジネスのイノベーションと最適化を支援します。NVIDIA の伝説的な DGX システムの最新モデルであり、NVIDIA DGX SuperPOD™ の基盤である DGX H100 は、画期的な NVIDIA H100 Tensor コア GPU を搭載し、AI の活用を押し進めます。AI スループットを最大化するように設計されており、高度に洗練され、システム化された拡張可能なプラットフォームを企業に提供し、自然言語処理、リコメンデーションシステム、データ分析などにおいて、飛躍的な進歩を達成できるように支援します。NVIDIA DGX H100 は、オンプレミスに導入できるほか、さまざまなアクセスと展開の選択肢があり、企業の大規模な課題を AI で解決するために必要なパフォーマンスを実現します。

AI の大規模活用の壁を打ち破る

NVIDIA DGX H100 は世界で初めて NVIDIA H100 Tensor コア GPU を搭載したシステムであり、AI のスケールとパフォーマンスの限界を突破します。NVIDIA ConnectX®-7 スマート ネットワーク インターフェイス カード (SmartNIC) で 9 倍のパフォーマンスと 2 倍高速なネットワーキングを実現し、NVIDIA DGX SuperPOD 向けのハイスピード スケーラビリティを提供します。この次世代アーキテクチャは、自然言語処理やディープ ラーニングによるレコメンデーション モデルなど、大規模で複雑な AI ジョブに対応できるように強化されています。

NVIDIA Base Command による強化

NVIDIA Base Command によって、すべての DGX システムはさらにパワーアップし、企業は進化した NVIDIA ソフトウェアを活用できるようになります。さらに、エンタープライズ レベルのオーケストレーションとクラスタ管理、コンピューティング、ストレージ、ネットワーク インフラストラクチャを高速化するライブラリ、AI ワークロードに最適化されたオペレーティング システムを含む実証済みのプラットフォームを使用して、DGX の可能性を最大限に引き出すことができます。また、DGX システムには NVIDIA AI Enterprise が含まれており、AI の開発と導入を効率化するために最適化されたソフトウェアスイートを提供します。

仕様

GPU	8x NVIDIA H100 Tensor コア GPU
GPU メモリ	合計 640GB
パフォーマンス	32 petaFLOPS FP8
NVIDIA® NVSwitch™	4x
システム消費電力	最大 10.2kW
CPU	デュアル x86
システムメモリ	2TB
ネットワーキング	4 個の QSFP ポートで 8 基のシングルポート ConnectZ-7 VPI への接続 400 Gb/s InfiniBand 200 Gb/s Ethernet 2 基のデュアルポート NVIDIA ConnectX-7 VPI 1x 400 Gb/s InfiniBand 1x 200 Gb/s Ethernet
管理ネットワーク	10Gb/s オンボード NIC (RJ45 付き) 50Gb/s Ethernet オプション NIC ホストベースボード管理 コントローラー (BMC) (RJ45 付き)
ストレージ	OS : 2x 1.9TB NVMe M.2 内部ストレージ : 8x 3.84TB NVMe U.2
ソフトウェア	NVIDIA AI Enterprise - AI ソフトウェア NVIDIA Base Command - オーケストレーション、スケジューリング、クラスタ管理 Ubuntu / Red Hat Enterprise Linux / CentOS - オペレーティングシステム
動作温度範囲	5 °C ~ 30 °C (41 °F ~ 86 °F)