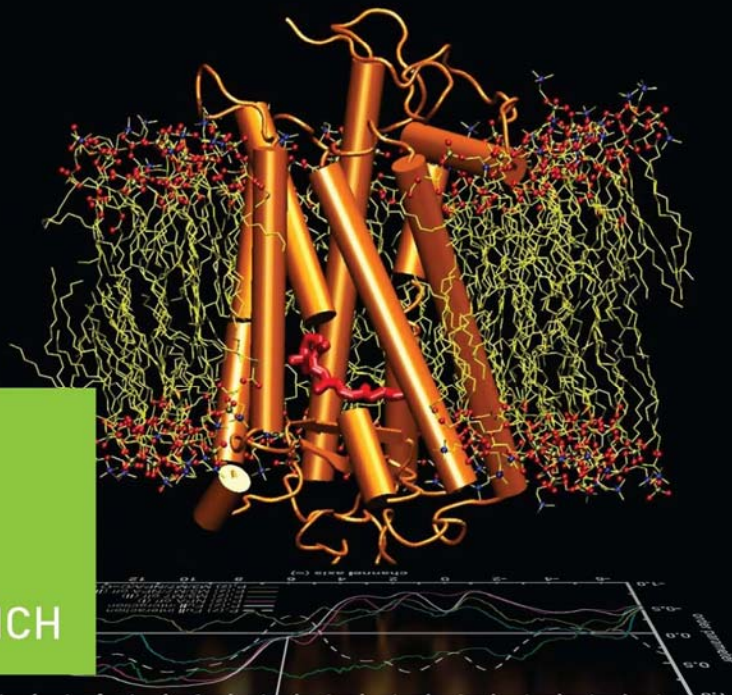




科学の新領域を拓く

TESLA™ BIO WORKBENCH

生物物理学者や計算化学者が生命科学の研究を行う際、今までは不可能だったことを可能にしてくれるのが、NVIDIA® Tesla™ Bio Workbench です。NVIDIA Tesla GPU を活用し、ごく普通の PC を「コンピュータショナル・ラボ」に変換して複雑な生命科学コードを実行可能とし、新薬の発見や DNA 塩基配列の決定を従来の 10 倍から 20 倍もの速度で実現できるのです。

Tesla Bio Workbench を構成するのは、生命科学分野の各種アプリケーション、そのようなアプリケーションのダウンロード・サイト、さらにアプリケーションについての議論や結果のチェックなどが行えるコミュニティ・サイト、そして、そのようなアプリケーションを CPU のみで構成されたコンピュータの 1/10 という低コストで実行できる GPU ベースのプラットフォームです。

今まではスーパーコンピューティング資源がなければ行えなかったほど複雑な分子シミュレーションが普通のワークステーションで行えるようになれば、研究のワークフローが最適化され、研究のペースが大幅に上昇します。同じシミュレーションを GPU ベースのサーバ・クラスタへとスケールアップすれば、スーパーコンピュータでなければ不可能だった巨大な分子や系のシミュレーションも可能になります。

たとえば、以下のようなアプリケーションは GPU で高速処理することができます。

- 分子動力学・量子化学
 - AMBER、GROMACS、HOOMD、LAMMPS、NAMD、TeraChem (量子化学)、VMD
- バイオインフォマティクス
 - CUDA-BLASTP、CUDA-EC、CUDA-MEME、CUDASW++ (Smith-Waterman)、GPU-HMMER、MUMmerGPU

詳しい情報は、http://www.nvidia.co.jp/object/tesla_bio_workbench_jp.html をご覧ください。

GPU ソリューション

Tesla Bio Workbench のアプリケーションは、GPU ベースのデスクトップ・パーソナル・スーパーコンピュータあるいはデータセンター・ソリューションで実行します。計算科学の進歩を加速できるように、革新的な超並列 CUDA™ GPU コンピューティング・アーキテクチャをベースとしたソリューションであり、いずれも、すでに購入可能な状況となっています。
www.nvidia.co.jp/tesla をご覧になると、以下の製品について詳しく知ることができます。

ワークステーション・ソリューション：



Tesla パーソナル・スーパーコンピュータ
机上でパーソナルなスーパーコンピューティングを実現

データセンター・ソリューション：



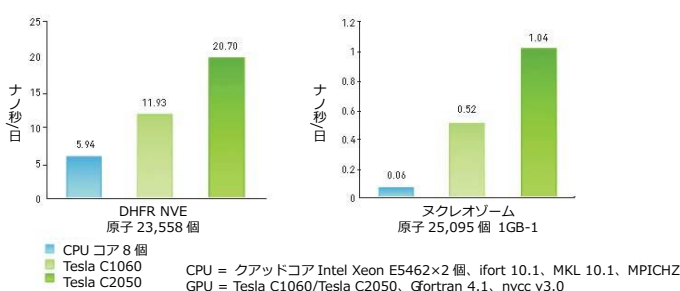
TESLA GPU コンピューティング・クラスタ
大規模設備を使用したコンピューティングに最適

GPU ベースの分子動力学・量子化学アプリケーション

AMBER

CUDA 対応 GPU を使用すると、AMBER による明示的溶媒や非明示的溶媒のシミュレーションを高速に行うことができます。CUDA アーキテクチャをベースとした Tesla GPU コンピューティング・ソリューションと組み合わせると、クアッドコア CPU 1 個の場合に対して処理速度が 10 倍以上にもなるのです。

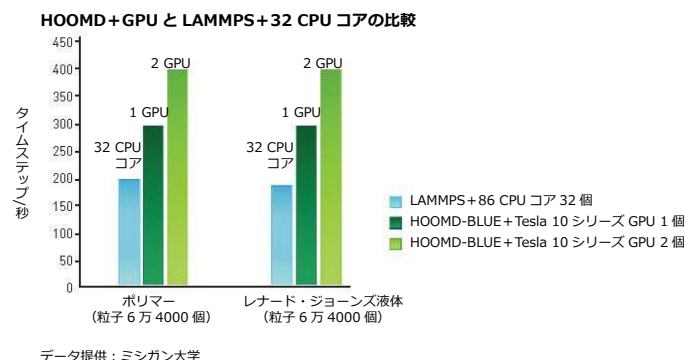
下記のデータは、明示的溶媒 PME と非明示的溶媒 GB のベンチマークです。詳細は、サンディエゴ・スーパーコンピューティング・センターの協力で作成した AMBER 11 NVIDIA ベンチマークのページに掲載されています。



HOOMD

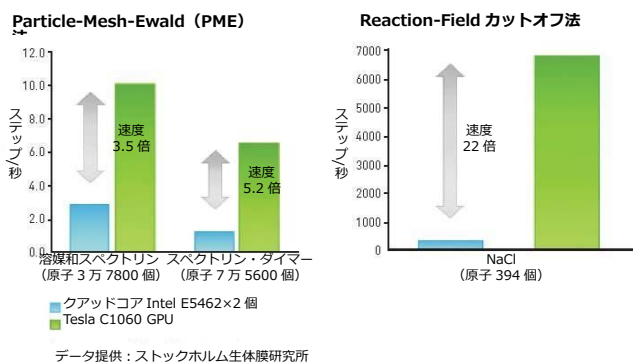
HOOMD-blue は、NVIDIA GPU の画期的な CUDA アーキテクチャの活用を念頭に基礎から構築された汎用の粒子力学パッケージです。さまざまな種類の力場や積分機能を持っていますし、オブジェクト指向となっているため、必要に応じて力場や機能を追加することも簡単に行えます。

HOOMD-blue のページでは、詳しいベンチマークを確認することができます。Tesla GPU 1 個と HOOMD-blue の組み合わせは、CPU コア 32 個を超える性能を発揮します。



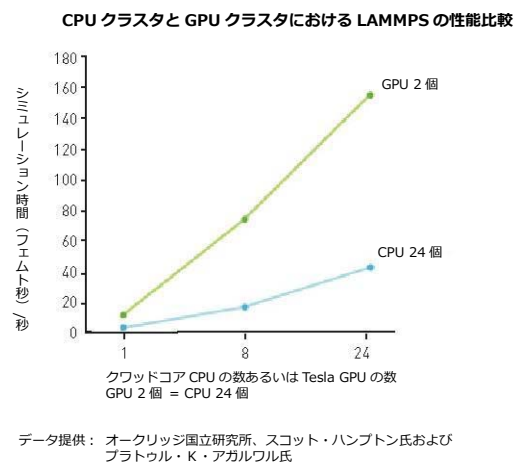
GROMACS

GROMACS は、タンパク質、脂質、核酸など、結合による相互作用が複雑な生化学的分子のシミュレーション用として開発された分子動力学パッケージです。現在、その GROMACS を CUDA へポーティングし、GPU による高速化に対応したベータ版が提供されています。このベータ版では、Particle-Mesh-Ewald (PME) 法、非結合相互作用の任意形状、非明示的溶媒の一般化ボルン (GB) 法がサポートされています。CUDA バージョンの GROMACS は、現在、シングル GPU のみのサポートで、その性能は以下のとおりです。



LAMMPS

LAMMPS は古くから使われている分子動力学パッケージで、並列マシンと相性がよいという特徴があります。CUDA バージョンの LAMMPS では、力の計算を GPU に分担させてスピードアップをはかっています。以下に示すように、GPU を使用した LAMMPS は、スケーリング性にも優れています。2 個の Tesla GPU と GPU-LAMMPS の組み合わせは、CPU 24 個を超える性能を発揮します。



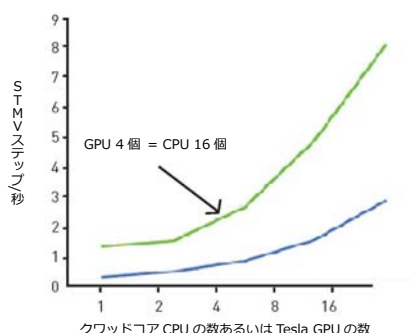
GPU ベースの分子動力学・量子化学アプリケーション

NAMD

NAMD については、2007 年、イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校 (UIUC) のチームが CUDA アクセラレーション対応を実現しました。UIUC が行った Tesla ベースの NCSA Lincoln クラスタにおけるスケーリング実験では、クアッドコア CPU 16 個のクラスタを超える性能を Tesla GPU 4 個で得ることができました。

以下に示すように、Tesla GPU クラスタにおける NAMD は、スケーリング性にも優れています。

CPU クラスタと GPU クラスタにおける NAMD の性能比較

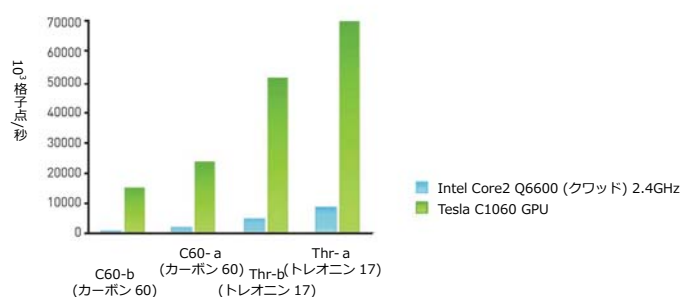


データ提供: UIUC 理論・計算生化学グループ

VMD

VMD は分子ビジュアライゼーションのプログラムで、3D グラフィックスと組込スクリプトを用いて巨大な生体分子系の表示やアニメーション、分析を行うことができます。VMD では主要なカーネルとアプリケーションの一部が NVIDIA GPU の超並列 CUDA アーキテクチャに対応しています。その結果、CPU のみのシステムと比較して、NVIDIA CUDA GPU 搭載システムでは、アプリケーションの実行速度が 20 倍から 100 倍にアップします。

VMD による分子軌道計算



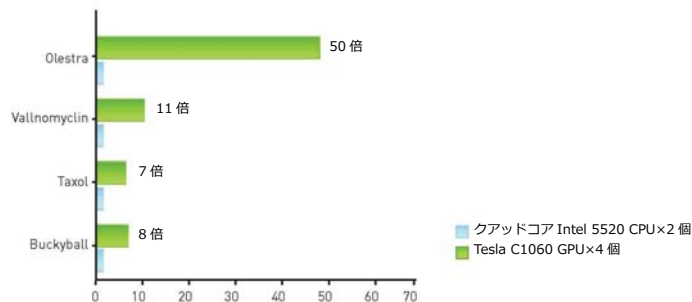
データ提供: UIUC 理論・計算生物物理グループ

TeraChem

TeraChem は、NVIDIA GPU の超並列 CUDA アーキテクチャの活用を念頭に基礎から構築された汎用の量子化学ソフトウェア・パッケージで、密度汎関数 (DFT) 法と Hartree-Fock (HF) 法に対応しています。

p スレッドを使った複数 GPU をサポートしているほか、MPI にも近日中に対応する予定です。Tesla GPU 4 個を搭載したワークステーションと TeraChem の組み合わせは、クアッドコア CPU 256 個と GAMESS の組み合わせを超える性能を発揮します。

CPU + GAMESS と比較した GPU + TeraChem の速度



データ提供: PetaChem

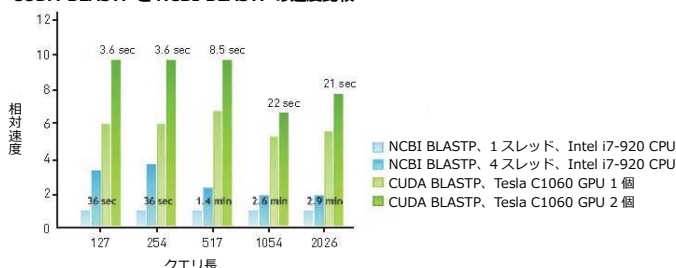
GPU ベースのバイオインフォマティクス・アプリケーション

CUDA-BLASTP

CUDA-BLASTP は、タンパク質配列データベースのスクリーンを行う NCBI BLAST を、NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャによってスピードアップするアプリケーションです。FASTA フォーマットのデータベースを CUDA-BLASTP で読み取れる形式のファイルに変換するユーティリティも用意されています。

Tesla C1060 GPU 2 個を搭載したワークステーションと CUDA-BLASTP を組み合わせると、Intel i7-920 CPU 1 個で NCBI BLAST (2.2.22) を実行する場合に比べて速度が 10 倍にもなります。つまり、CPU では分単位の時間がかかる処理が、GPU を活用すると秒単位となるわけです。

CUDA-BLASTP と NCBI BLASTP の速度比較



CUDA-EC

CUDA-EC は、高速動作のショート・リード用並列シーケンス・エラー訂正ツールです。HTSR (High-Throughput Short-Read) データにおけるシーケンシング・エラーを修正するとともに NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャを活用し、HTSR 処理速度を大幅に高めてくれます。DNA フラグメントアセンブリ・ツールは前処理としてエラー訂正を行うものが多く、最近のハイスループット DNA シーケンサーではエラー訂正が重要な役割を果たします。

Tesla C1060 GPU 1 個と CUDA-EC の組み合わせは、x86 CPU 1 個と Euler-SR の組み合わせと比較して処理速度が 20 倍にもなります。つまり、CPU では分単位の時間がかかる処理も、GPU なら秒単位で終了するわけです。5 種類のゲノムについて処理速度を比較した下図で、A1、A2、A3 など誤り率が 1%、2%、3%

CUDA-BLASTP と NCBI BLASTP の速度比較

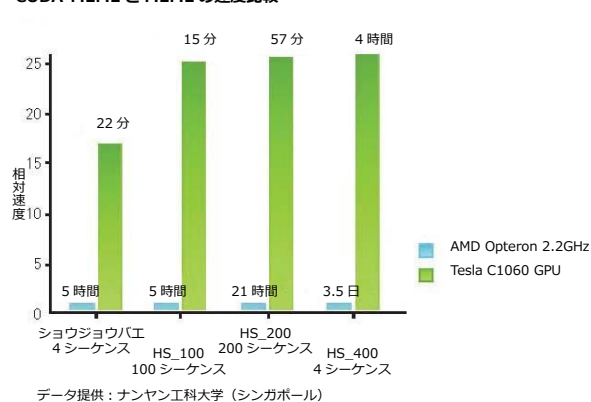


CUDA-MEME

CUDA-MEME は、MEME (バージョン 3.5.4) をベースとしたモチーフ発見ソフトウェアで、NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャによって高速に処理を行うことができます。MEME では、OOPS と ZOOPS をサポートしています。

Tesla C1060 GPU 1 個と CUDA-MEME との組み合わせは、x86 CPU 1 個と MEME の組み合わせと比較して処理速度が 23 倍にもなります。つまり、CPU では時間単位の時間がかかる処理も、GPU を活用すると分単位で終了するわけです。以下の図は、OOPS (One Occurrence Per Sequence) モデルで 4 種類のデータ・セットを処理した場合の結果です。

CUDA-MEME と MEME の速度比較

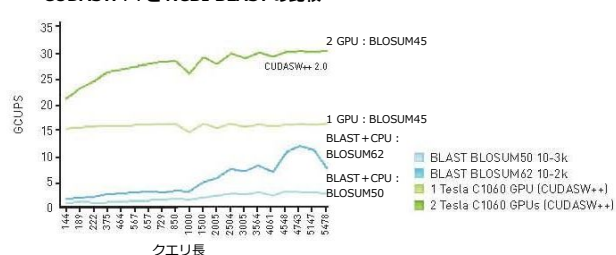


CUDASW++ (Smith-Waterman)

CUDASW++ は、タンパク質データベースについて Smith-Waterman 検索を行うバイオインフォマティクス・ソフトウェアで、NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャを活用して、NCBI BLAST の 10 倍から 50 倍という高速でシーケンス検索を行うことができます。CUDASW++ は、59K までのクエリ長に対応しています。

CUDASW++ は複数の Tesla GPU が利用可能で、NCBI BLAST に対して 10 倍から 50 倍のスピードアップが行えます。5000 を超えるクエリ長で最大 30 GCUPS (Giga Cells Updates per Second) が得られるのです。BLAST はヒューリスティックなアルゴリズムであるのに対し、CUDASW++ は Smith-Waterman アルゴリズムによってローカルアライメントの最適化を図っています。

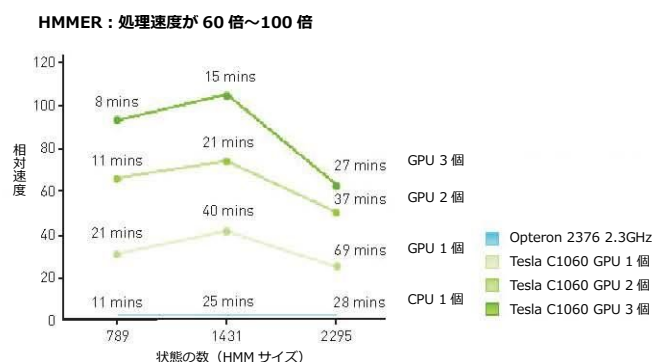
CUDASW++ と NCBI BLAST の比較



GPU-HMMER

GPU-HMMER は、プロファイル HMM を使ってタンパク質シーケンスのアライメントを行うバイオインフォマティクス・ソフトウェアで、NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャによって高速に処理を行うことができます。GPU-HMMER は、HMMER (2.0) に対して処理速度が 60 倍から 100 倍にも達します。

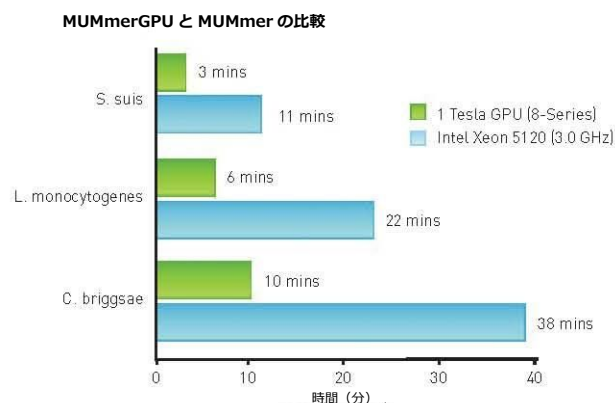
GPU-HMMER では GPU を使って HMM 検索ツールをスピードアップし、60 倍から 100 倍ものスピードアップを実現します。1 台のワークステーションに複数の Tesla GPU が搭載されていればすべての GPU を活用可能で、CPU では時間単位の時間がかかる処理を分単位まで短縮することができます。



MUMmerGPU

MUMmerGPU は GPU によってシーケンス・アライメントをハイスループットで行うバイオインフォマティクス・ソフトウェアです。ひとつのレファレンス・シーケンスに対して複数のクエリシーケンスをアライメントする処理を、NVIDIA Tesla GPU の超並列 CUDA アーキテクチャによって高速で行うことができます。

MUMmerGPU (バージョン 2.0) では、CPU と MUMmer の組み合わせに対して 3 倍から 4 倍のスピードアップが実現できます。下図は MUMmerGPU バージョン 1.0 のデータであり、近日中にバージョン 2.0 のデータにアップデートします。



NVIDIA Tesla Bio Workbench の詳細については、

http://www.nvidia.co.jp/object/tesla_bio_workbench_jp.html
をご覧ください。

