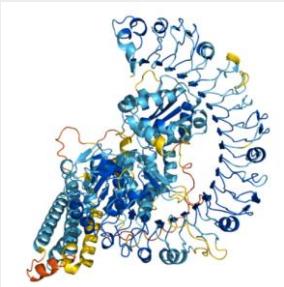


AlphaFold2



AlphaFold2とは

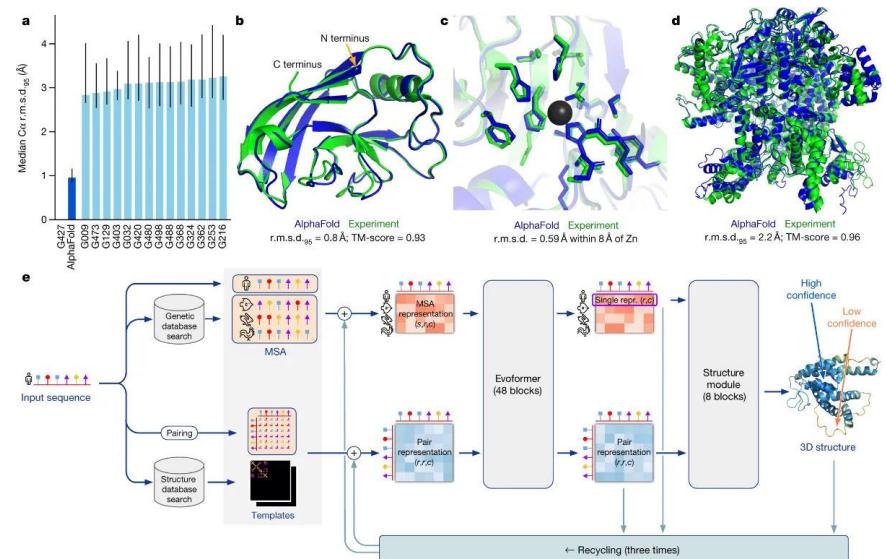
2020年DeepMind社が発表した「AlphaFold2」はディープラーニングを用いて、わずかな時間でアミノ酸配列からそのタンパク質の立体構造を極めて高い精度で予測できることを示しました。

この予測技術は生命科学全般の研究に大きな影響を与えた2024年AlphaFold2を開発したデビッド・ベーカー氏、デミス・ハサビス氏、ジョン・ジャンパー氏の3氏にノーベル化学賞が贈られました。

研究背景と位置づけ

タンパク質は生命の基礎構成要素であり、その3次元構造を理解することはタンパク質の機能解明において不可欠です。しかしながら、実験的にタンパク質構造を決定するには膨大な労力と時間（数ヶ月から数年）を要します。そのため、Protein Data Bankに登録されている構造は約10万種にとどまり、数十億種類存在すると言われるタンパク質配列のごく一部に過ぎません。

50年以上前から「タンパク質折りたたみ問題」として知られるこの課題に対し、計算科学的アプローチが試みられてきましたが、既存の手法は原子レベルの精度に達しておらず、特に類似構造が存在しない場合の予測は困難でした。これまでの手法は主に物理的相互作用に基づくアプローチと進化的履歴に基づくアプローチの二つの経路で発展してきましたが、どちらも生物学的応用可能なレベルの精度には達していませんでした。

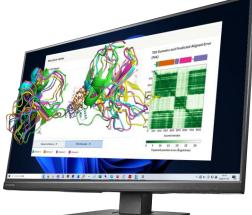


1. Evoformer : MSA表現とペア表現を処理する革新的なニューラルネットワーク構造で、タンパク質の空間的・進化的関係性を推論します。
2. 構造モジュール：明示的な3D構造を回転と並進の形で各残基に導入し、高精度なタンパク質構造を精緻化します。
3. frame-aligned point error (FAPE) 損失閾値：予測された原子位置と真の位置を多様な整列の下で比較し、残基の局所フレームに相対的な原子の正確さに強いバイアスを与えます。

稼働させるハードウェアに必要な条件



POINT 01 グラフィック並列処理能力



AlphaFold2はGPUを必要とするソフトウェアです。GPGPUの並列処理を行うため、CUDAコア数が多いものが推奨されます。



POINT 02 大容量データ

AlphaFold2は2.2TBほどの巨大なデータベースを参照するため、ストレージ性能がパフォーマンスに大きく影響します。



POINT 03 演算処理能力

ハードウェア全体の処理速度に関するCPUも重要になります。GPUのボトルネックにならないための水準が必要となります。



POINT 04 大容量メモリ

処理を長時間安定した動作で行うためには、ある程度のメモリ容量も必要になるため、出来る限り余裕のある容量を推奨します。

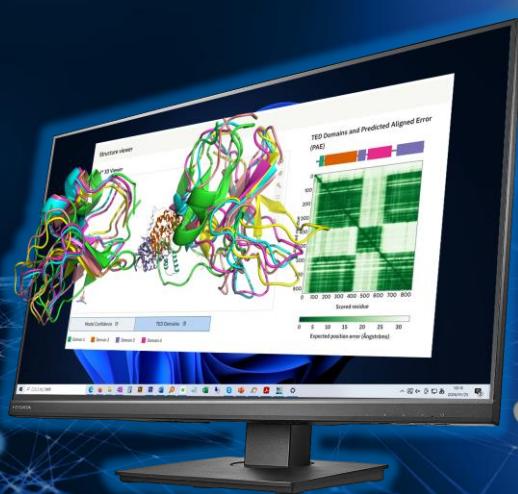
AlphaFold2は、ディープラーニングを快適に行うためのスペックが必要です。

AIモデル開発には、大きく「学習」と「推論」の2つのフェーズがありますが、学習は、大量のトレーニングデータからモデルを学習させる過程です。求められるPCスペックは高性能で大容量なハードウェア(多コアCPU・多コアGPU・大容量メモリ)が必要になります。推論は、学習済みモデルに新しい入力データを与えて予測や分類を行う過程です。学習時ほどの負担はありませんが、処理能力が高ければ高い効率を上げることができます。

タンパク質構造予測ソフト

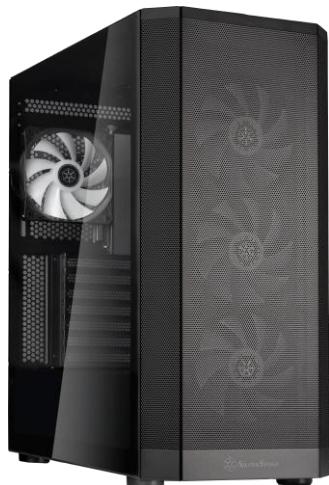
AlphaFold2

ソフトのディープラーニング処理を快適にするために
お勧めのワークステーション / HPCのご案内



————— AlphaFold2におすすめのワークステーション ————

Core Ultra9 × RTX 4500Adaのコストパフォーマンスの高いモデル



■CPU : Intel CoreUltra 9 285K

P8コア P:3.7~5.5GHz

■メモリ : 128GB(64GB x2) DDR5-6400

■SSD1 : 1TB M.2 NVMe SSD R:7250MB/s W:6900MB/s

■SSD2 : 4TB M.2 NVMe SSD R:7000MB/s W:6700MB/s

■OS : Ubuntu 22.04 LTS インストール代行

■GPU : NVIDIA RTX 4500Ada 24GB GDDR6 ECC

■1年間センドバック保証

Be-Clia Type-ZU2V2-9
NVIDIA RTX 4500Ada搭載
カスタマイズモデル

価格・仕様書・お見積りの発行などの
お問合せは担当者までご連絡ください。

Xeon W5 × RTX 5000Adaの
高性能ワークステーション



■CPU : Intel Xeon W5-2545
12コア24スレッド 3.5~4.7GHz
■メモリ : 256GB(64GB x4) DDR5-6400
■SSD1 : 1TB M.2 NVMe SSD
R:7250MB/s W:6900MB/s
■SSD2 : 4TB M.2 NVMe SSD
R:7000MB/s W:6700MB/s
■OS : Ubuntu 22.04 LTS インストール代行
■GPU : NVIDIA RTX 5000Ada 32GB
GDDR6 ECC
■3年間センドバック保証

CERVO Grasta Type-ALIS25WC-W5
NVIDIA RTX 5000Ada搭載
カスタマイズモデル

価格・仕様書・お見積りの発行などの
お問合せは担当者までご連絡ください。

EPYC96コア × RTX 6000Adaの
ハイエンドワークステーション



■CPU : AMD EPYC 9654
96コア192スレッド 2.4GHz~3.7GHz
■メモリ : 512GB(64GB x8) DDR5-4800
■SSD1 : 960GB U.3 NVMe SSD
R:6800MB/s W:1400MB/s
■SSD2 : 7.68TB U.3 NVMe SSD
R:6800MB/s W:5600MB/s
■OS : Ubuntu 22.04 LTS インストール代行
■GPU : NVIDIA RTX 6000Ada 48GB
GDDR6 ECC
■3年間センドバック保証

HPC Grasta Type-EPYC-MIS4SP
NVIDIA RTX6000Ada搭載
カスタマイズモデル

価格・仕様書・お見積りの発行などの
お問合せは担当者までご連絡ください。

*APPLIED アプライド株式会社 広域システム営業部

■関東営業所 東京都千代田区神田須田町1-2-7-8F ☎ TEL : 03-5280-9255
■東海営業部 名古屋市西区上名古屋三丁目25-28-5F ☎ TEL : 052-325-2782

■関西営業部 大阪市淀川区西中島2丁目14-6-5 ☎ TEL:06-6838-4123
■九州営業部 福岡市博多区上牟田1丁目6-23 ☎ TEL : 092-481-7812