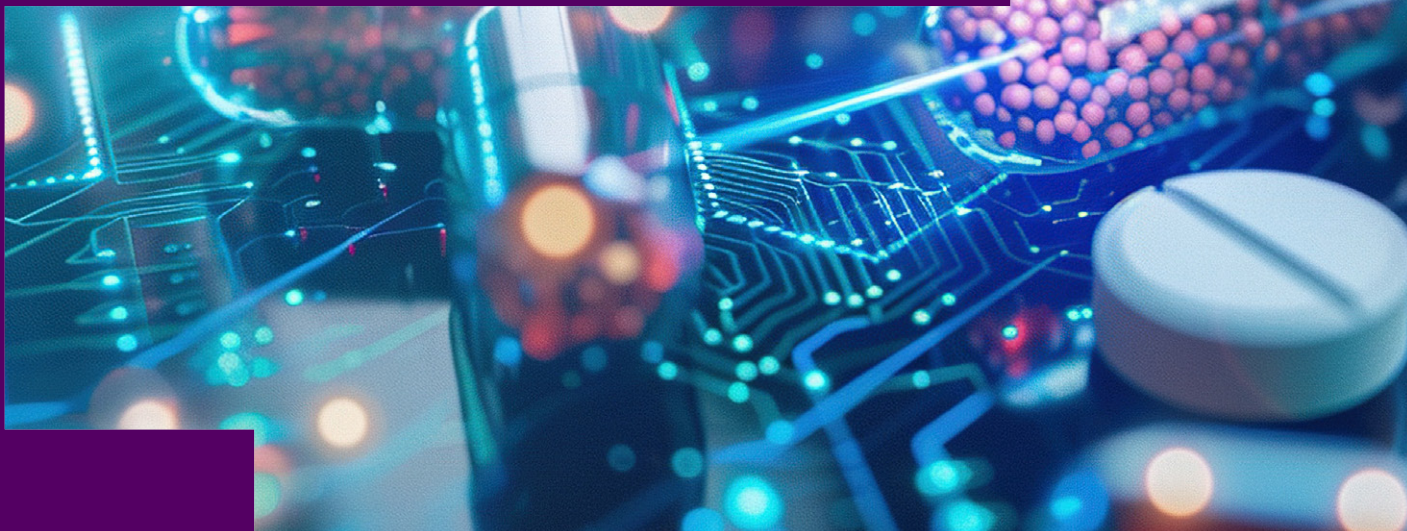


# Tokyo-1いよいよ始動 東京発、AI創薬への挑戦を支える NetAppオールフラッシュアレイ



2024年2月、三井物産の戦略事業会社ゼウレカ(Xeureka)が、AIやシミュレーション技術を活用した創薬を支援する「Tokyo-1」のサービス提供を開始しました。Tokyo-1は日本の製薬企業様をつなぎ、共同研究や知見の共有を推進することで、デジタル創薬を変革する『イノベーションハブ』の形成を目指すものです。これを実現するために、Tokyo-1では、NVIDIA DGX H100とNetApp AFF A400を中心とするハイスペックGPUスパコン、創薬DXのための「ソリューション群」、製薬企業を巻き込んだ「情報コミュニティ」を三位一体として提供しています。



## 三井物産のAI創薬事業会社として設立

1,000億円以上に達する研究開発費、10～20年に及ぶ開発期間、1%未満という開発成功率——ひとつの新薬を市場に送り出すために越えなければならない壁は、今後さらに高くなるだろうと言われています。開発期間の短縮と成功率の改善は製薬業界共通の課題となっています。ゼウレカでTokyo-1事業部長を務める白石直樹氏は次のように話します。

「AIやシミュレーション技術の活用が、創薬研究における様々な困難を打開する切り札として大きな期待を集めています。Tokyo-1は、ハイスペックのGPUスパコン、創薬DXソリューション、情報コミュニティの提供を通じて、日本の製薬企業様と製薬業界のための『AI創薬の基盤』の実現を目指すプロジェクトです。Tokyo-1に参画する企業様をつないで共同研究や知見の共有を推進し、新しい化学反応が次々と起こるイノベーションハブとしての役割を特に重視しています」

ゼウレカ (Xeureka) は、三井物産のAI創薬事業会社として2021年11月に設立されました。X(未知)をeureka(発見する)という意味を持つ社名には、「AI創薬」という新領域を切り拓く決意が込められています。

「NVIDIA DGX H100とNetApp AFF A400を採用し、AIモデルの開発と推論の実行を担うGPUスパコンを整備しました。Tokyo-1は、『AI創薬』のためのハイスペックのシステムとソリューションに加え、これらを支える人材とサービスを統合的に提供することで、日本の製薬企業様のDX化の加速や開発力・競争力の強化を支援していきます」(白石氏)

三井物産とゼウレカが主導したTokyo-1の構想は、アステラス製薬、小野薬品工業、第一三共の3社の賛同を得て具現化されました。

### マルチテナント環境で専有領域と共有領域を整備

Tokyo-1では、複数のテナント企業それぞれが「NVIDIA DGX H100を専有」できるユニークな利用モデルを採用しています。これにより、「使いたいときにいつでも使えるGPUスパコン」という環境が実現されました。

「創薬研究を扱う性質上、Tokyo-1における情報の秘匿義務とセキュリティは極めて厳格に定められています。一方で、Tokyo-1は共同研究を推進する基盤としての役割も併せ持っています。これを実現するために、Tokyo-1のサービス基盤は『テナント企業ごとの専有領域と厳格なセキュリティ』を確保しつつ、『共用・公開データを自由に利用できる共有領域』を備えていることが大きな特徴です」と白石氏は話します。

創薬研究には化合物やタンパク質の公共データベースの利用が欠かせません。Tokyo-1では、創薬研究で頻繁に利用されるデータやライブラリをあらかじめ共有領域に格納し、テナント企業が安全に利用できるよう整備しています。

## KEY BENEFITS

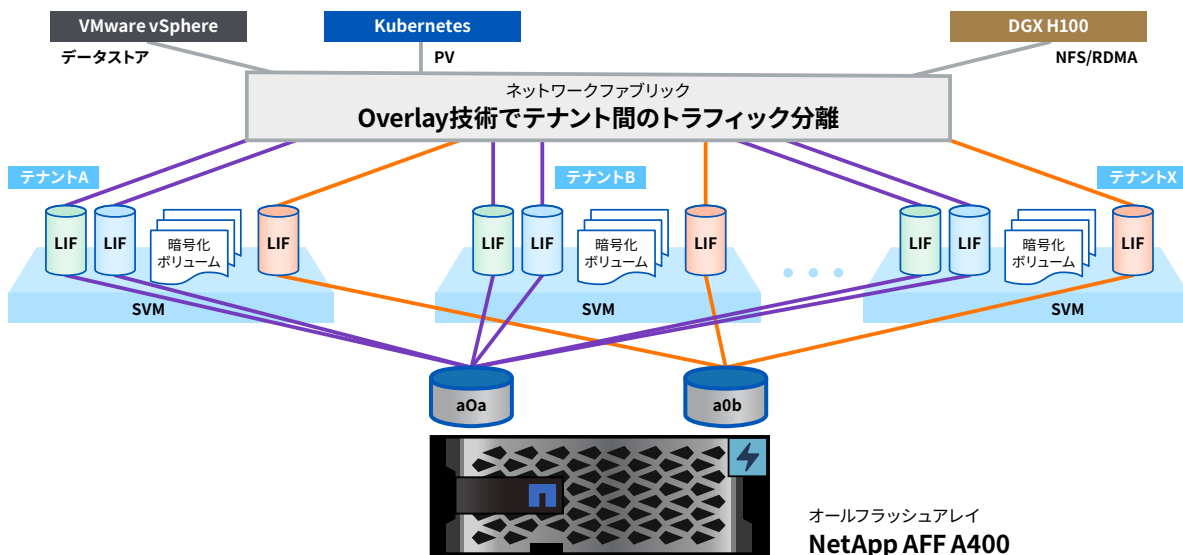
- NetApp AFF A400でNFS over RDMAを利用し、NVIDIA DGX H100による学習・推論を高速化するストレージパフォーマンスを提供
- ONTAPストレージOSがマルチテナント環境における厳格なセキュリティを実現、テナント企業ごとの「専有領域」と各社が使う「共有領域」を安全に両立



株式会社ゼウレカ  
Tokyo-1事業部長 PMP  
白石 直樹氏



三井情報株式会社  
ソリューション第二技術本部 イノベーション推進部  
部長 石原 慎也氏



本システムの設計・構築を担ったのは、バイオインフォマティクス領域で豊富な実績を持つ三井情報でした。同社 イノベーション推進部 部長の石原慎也氏は、「研究・計算内容は他のテナントから絶対に見えてはなりません。一方で、共有データには自由にアクセスして手間なく使いたいというご要求もあり、二律背反する要件をいかに両立させるかが難題でした」と話しつつ次のように続けます。

「サービス基盤は、DGX H100×16ノードとNetApp AFF A400によるシステムを1単位とし、ここに最大10テナントを収容する基本設計としました。ONTAPストレージOSのStorage Virtual Machine (SVM)を利用してテナントごとに独立したストレージ領域を提供し、ボリューム単位での暗号化を実装しています」

ストレージネットワークはイーサネット構成し、各テナントのレイヤ2トラフィックをONTAPのオーバーレイ技術によりセキュアに分割する方法が採られています。

「専有領域と共有領域でポリシーに応じた書き込みと読み出しの権限をきめ細やかに設定し、それぞれを適切にコントロールすることが必須でした。セキュアなマルチテナント環境、暗号化とテナントごとの鍵管理、多様なプロトコルへの対応、優れた性能などを含め、私たちが設定した要件に完全に答えることができたのはNetAppだけでした」(石原氏)

### NetApp AFF A400ならではの多用途への適用

NetApp AFFは、業界をリードするパフォーマンスとONTAP 9のデータ管理機能が高く評価されているオールフラッシュレイです。Tokyo-1のサービス基盤に採用されたNetApp AFF A400は、4Uの筐体でデュアルコントローラーをActive-Activeで稼働させ、高いパフォーマンスと優れた耐障害性を

実現します。

Tokyo-1のサービス基盤において、NetApp AFF A400は大きく4つの役割を担っています。

- ①ホームディレクトリ:NFS over RDMAによりDGX H100と接続し高速に学習・推論を実行
- ②パースistentボリューム:MLOpsを担うコンテナ & Kubernetes用途
- ③共有ディレクトリ:化合物データベースやライブラリなどを複数テナントで共有
- ④データストア:認証やシステム運用管理のためのVMwareによる仮想化環境向け

「NetApp AFF A400とDGX H100の接続にはNVIDIA GPUDirect Storage (GDS)を利用しており、Remote Direct Memory Access (RDMA) をNFS上で実装しています。ONTAPではDGX H100側には何も手を加えずにRDMA (RoCEv2)を利用できるため、システムを構築する上でも運用段階でもそれぞれ大きなメリットがありました」と石原氏は話します。

GDSは、DGX H100上のCPUとメインメモリを経由せず、NetApp AFF A400とGPUメモリ間でデータを直接やりとりする技術です。RoCEv2はイーサネット上でRDMAを実現し、大規模なデータ処理と高速なデータ通信が求められるAI学習・推論のタスクで大きな威力を発揮します。RDMAは輻輳によるデータ損失の抑制にも有効です。

### 複数の製薬企業が連携する前例のないチャレンジ

Tokyo-1を利用している企業は、それぞれ独自にAI創薬へのチャレンジを進めてきました。それでもTokyo-1に参画した理由はどこにあったのでしょうか。白石氏は次のように話します。



(左より)株式会社ゼウレカ Tokyo-1事業部長 PMP 白石直樹氏 / 三井情報株式会社 執行役員 先端テクノロジー管掌 イノベーション戦略推進責任者 内田利文氏 / 三井情報株式会社 ソリューション第二技術本部 イノベーション推進部 部長 石原慎也氏

「製薬企業様の間で知見を共有するTokyo-1独自の枠組みに対して、一定のご理解と共感をいただけたことが大きいのではないかと考えています。非競争領域に着目し、製薬企業様同士が情報交換や連携できる場をTokyo-1が提供できたことに大きな意義を感じています」

## Tokyo-1のサービス基盤にはNVIDIA DGX H100とNetApp AFF A400を採用し、AIモデルの開発と推論の実行を担うGPUスパコンを整備しました。

株式会社ゼウレカ Tokyo-1事業部長 白石 直樹 氏

どうすれば連携できるのか、どこまで情報が出せるのか——製薬業界では前例のない取り組みにおいて、Tokyo-1の情報コミュニティの骨格づくりが困難な道程であったことは容易に想像できます。システムの視点から石原氏は次のように話します。

「Tokyo-1のサービス基盤における『共有部』は、まさにそうしたせめぎ合いの中で設計・構築する必要がありました。ヒアリングを重ねながら全体をデザインし、システム要件に落とし込んでいく過程には最も大きな困難がありました。最終的に辿り着いたTokyo-1のアーキテクチャは、セキュリティと使いやすさを両立させつつ、変化し続ける要求に対して優れた適応力を備えたものとなりました」

Tokyo-1が本格的にサービスを開始して半年、日本のデジタル創薬の明日を担うハイスペックのGPUスパコンは24時間安定的に稼働し続けています。

「中でも、NetApp AFF A400は複数のDGX H100からの高負荷に平然と応え続けており、運用面での不安要素はまったくありません。NetAppストレージならではの高い性能と信頼性を改めて体感しています。三井情報としては、NetAppストレージはエンタープライズ領域での実績が豊富ですが、AI分野・GPU as a Service分野での競争力も非常に高いことが確認できました」(石原氏)



NetApp AFF A400

東京発の創薬イノベーションへ——Tokyo-1の挑戦は始まったばかりです。「今後は、大手製薬企業様だけでなく、医療機器メーカー様やバイオテック企業様の参画にも期待しています」と話しつつ白石氏は次のように結びました。

「世界を見渡すと、デジタル創薬とAI活用における開発・競争はますます激しくなると見込まれます。そのような状況下、Tokyo-1は日本の製薬企業様の変革を支援するイノベーションハブとなることで、世界レベルでの開発力・競争力強化に貢献していきます。巨大投資で先行する世界のメガファーマとの競争を勝ち抜くためにも、Tokyo-1のプラットフォームと情報コミュニティを活用いただきたいと思います。NetAppには、Tokyo-1を支える強固でかつ柔軟性のある優れたストレージ製品とソリューションを提供し続けてもらえることを期待しております。」



**NetApp 製品について、  
詳しくはこちら**

### NetApp product

・NetApp AFF A400

### Alliance partner

三井情報株式会社



**MKI 三井情報株式会社**  
MITSUI KNOWLEDGE INDUSTRY



ネットアップ合同会社

<https://www.netapp.com/ja/forms/sales-contact/>

ネットアップはグローバルなクラウド戦略で業界をリードする、Data-Centricなソフトウェア企業です。企業や組織が独自のデータファブリックを構築し、クラウドでの開発、クラウドへの移行、オンプレミスでの独自のクラウドレベルの環境構築など、データセンターからクラウドまでのアプリケーションを最適な状態で実行できるシステム、ソフトウェア、クラウド サービスを提供しています。グローバル企業がデータのポテンシャルを最大限に引き出し、お客様とのコンタクトの強化、イノベーションの促進、業務の最適化を図れるよう、パートナー様とともに取り組んでいます。

詳細については、[www.netapp.com/jp](http://www.netapp.com/jp)をご覧ください。



© 2024 NetApp, Inc. All rights reserved. 記載事項は、予告なく変更される場合があります。内容の一部または全部をNetApp, Inc.の許可なく使用・複製することはできません。NetApp、NetAppロゴ、SolidFireは、米国およびその他の国におけるNetApp, Inc.の登録商標です。その他記載のブランド・製品名は、それぞれの会社の商標または登録商標です。