



AWSのHPCへの取り組みと 創薬分野での事例

佐々木 啓

アマゾンウェブサービスジャパン合同会社

ソリューションアーキテクト

2023年10月25日

自己紹介

佐々木 啓 / Sasaki Kei

アマゾン ウェブ サービス ジャパン 合同会社
パブリックセクター技術統括本部
ソリューションアーキテクト

大学・研究機関のアカウントチームの一員として、
研究・教育・事務のクラウド化を推進するお客様の技術支援を担当



本セッションでお伝えしたいこと

- 創薬研究・開発領域におけるクラウドHPCがもたらす価値
- クラウドHPCの最新活用事例
 - クライオ電子顕微鏡ワークフローのAWSクラウドHPCの活用
 - 分子動力学ソフトウェアGENESISのAmazon EC2 Armインスタンスへの展開

創薬研究・開発において クラウドHPCがもたらす価値

研究・開発における計算インフラの課題

1. 計算需要は研究・開発のフェーズによって変動し、一時的な需要増加や大規模な計算に対応したい
2. 計算手法が多様化し、求められる計算環境（メモリ量やアクセラレータの有無、ソフトウェア環境等）が異なる
3. データやインフラを外部の研究者とセキュアに共有・連携することが困難
4. ハードウェアの調達・保守管理に手間がかかる

クラウド / クラウド HPC とは？

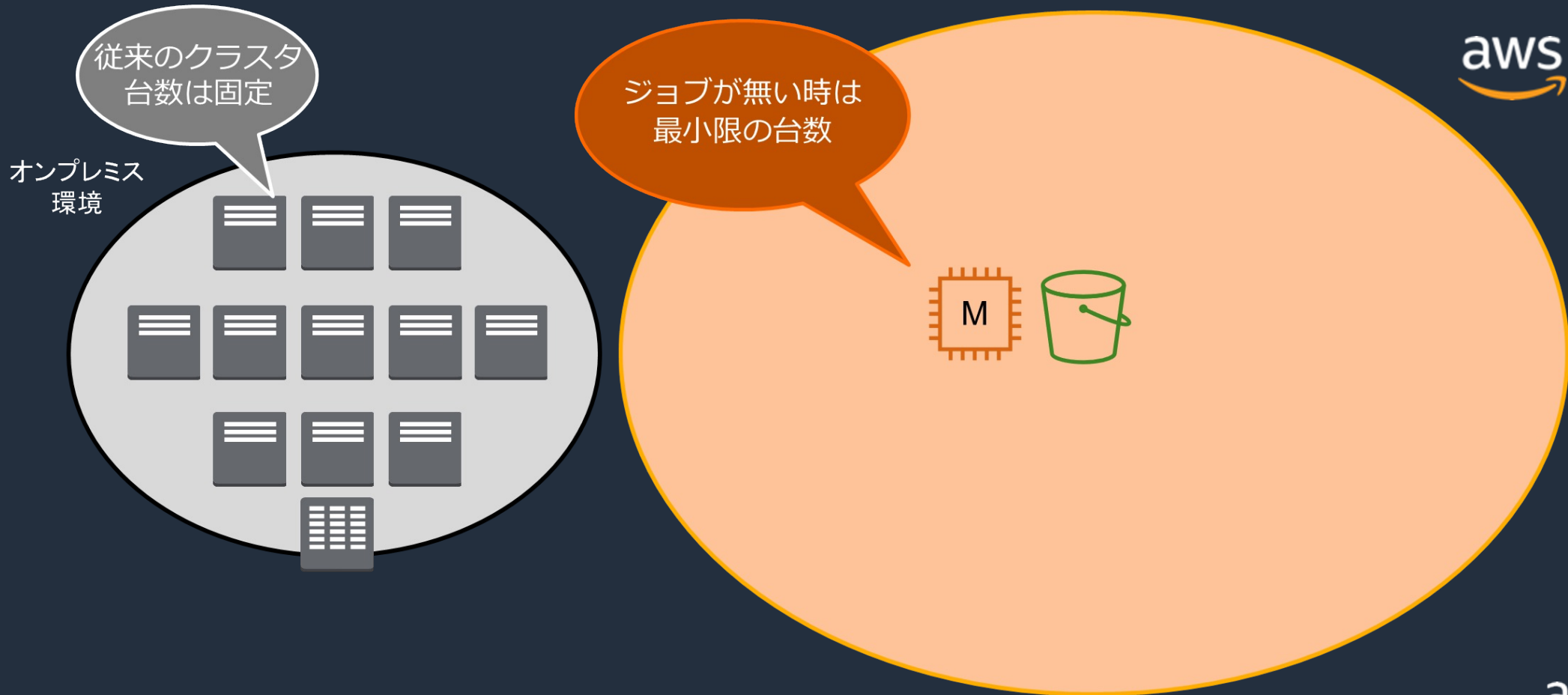
単に既存環境の置き換えとして
クラウドを利用するだけではなく
課題・ボトルネックを解決する



研究の本質に集中 研究を加速

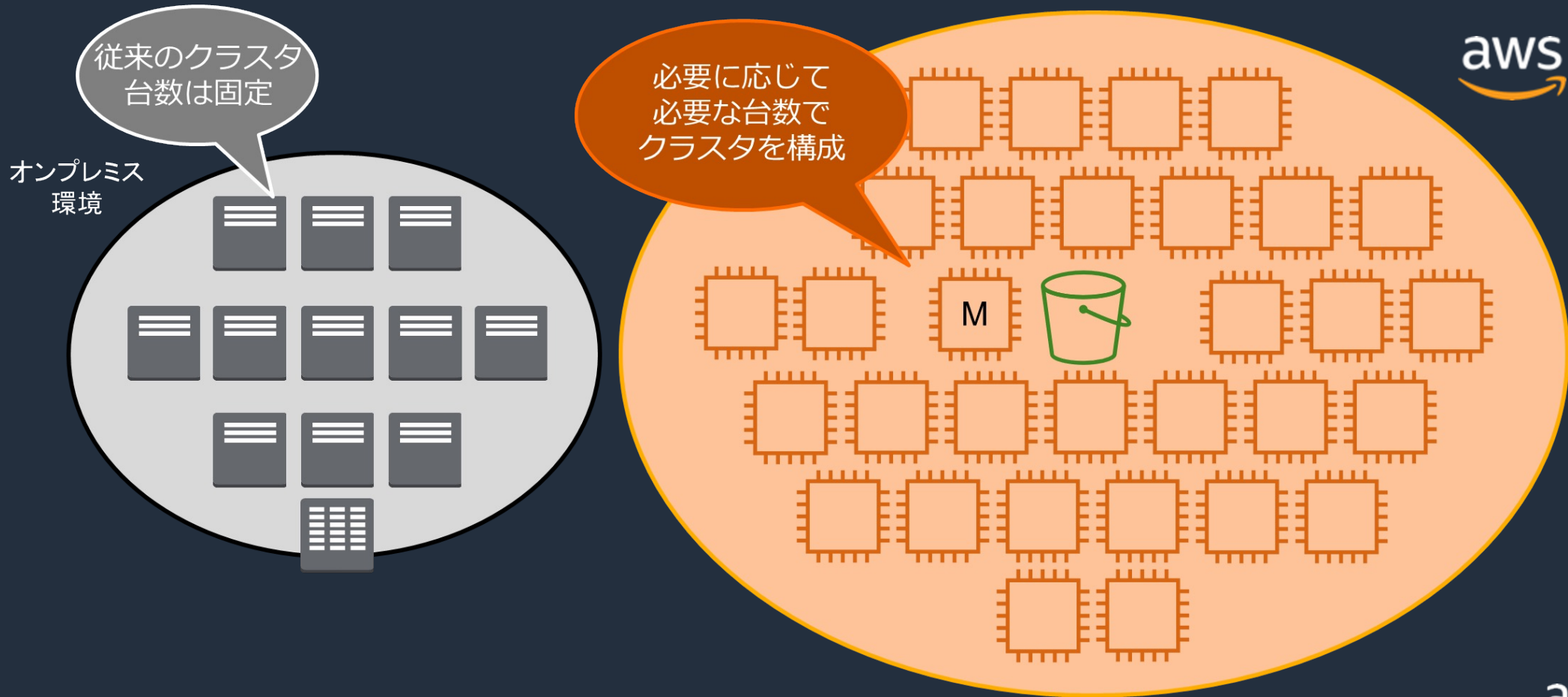
必要な時に必要な計算リソースを活用

スケーラブルなリソースによりコスト効率よく大規模な処理を実行



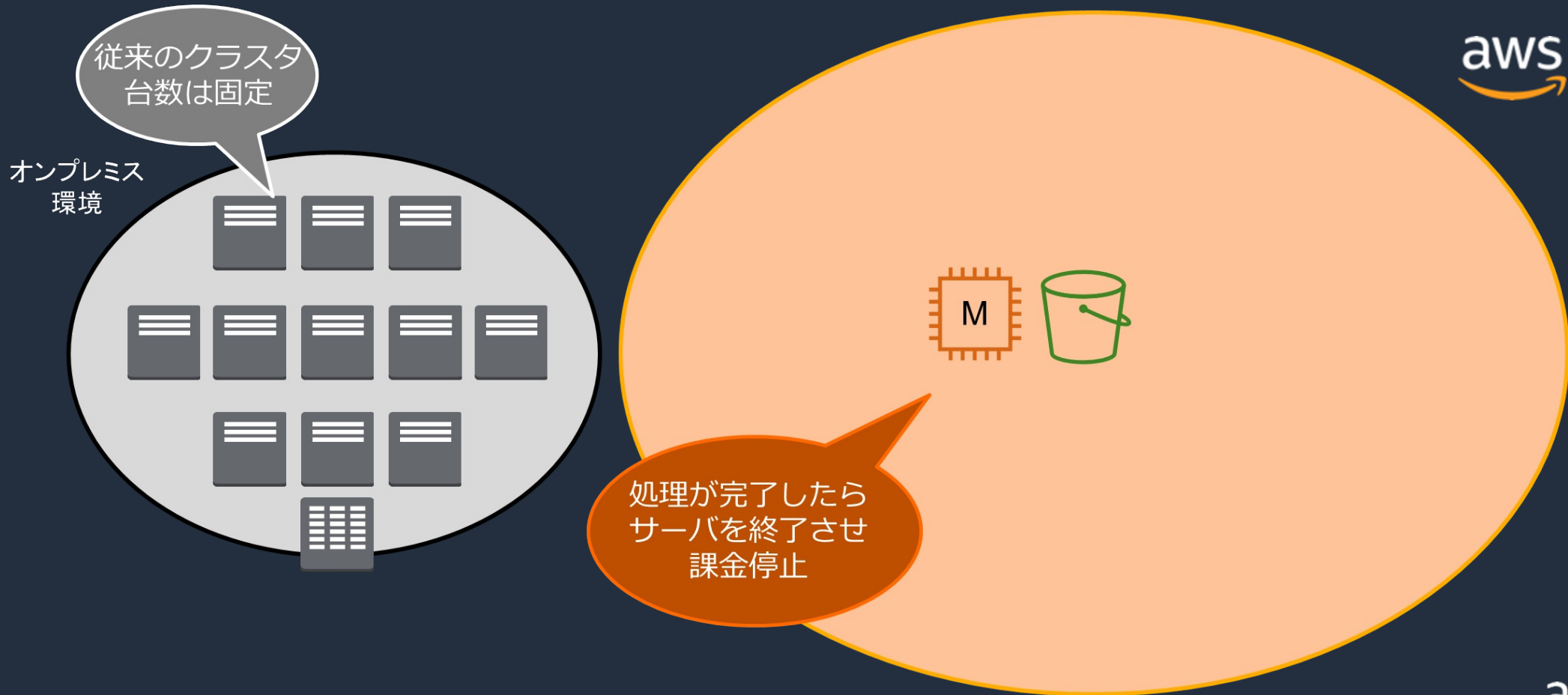
必要な時に必要な計算リソースを活用

スケーラブルなリソースによりコスト効率よく大規模な処理を実行



必要な時に必要な計算リソースを活用

スケーラブルなリソースによりコスト効率よく大規模な処理を実行



スケーラビリティの活用による計算時間短縮

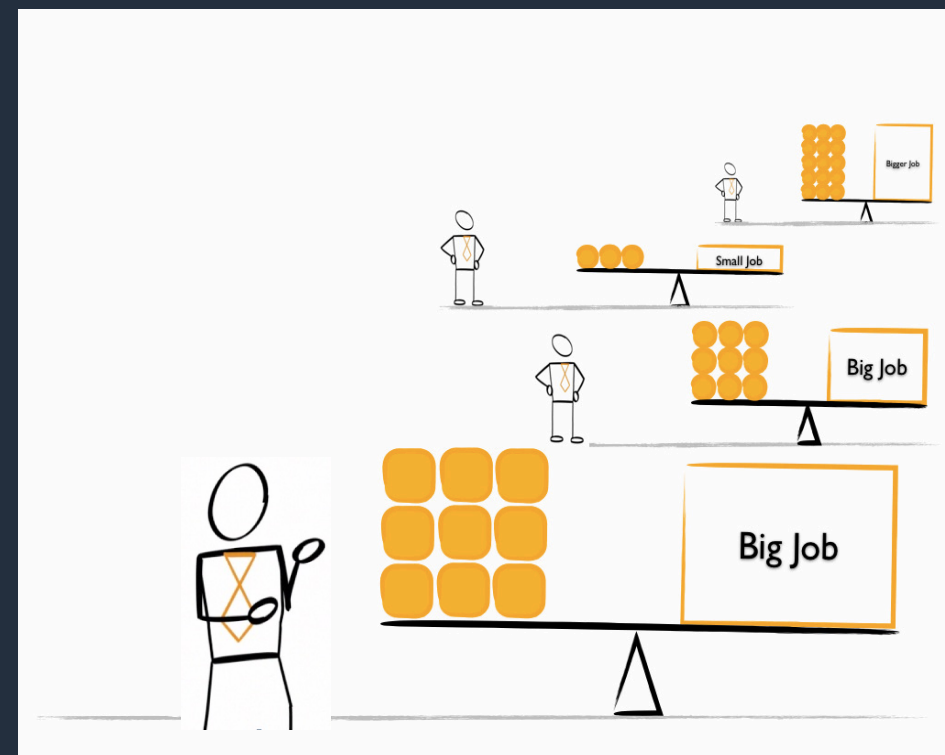


従来は手持ちの限られたリソースで、逐次処理していたジョブも
AWSなら必要な台数、インスタンスを起動して、一斉処理
しかも費用は「時間×台数」なのでどちらも同じ

アプリケーションに合わせた構成のクラスタを構築可能

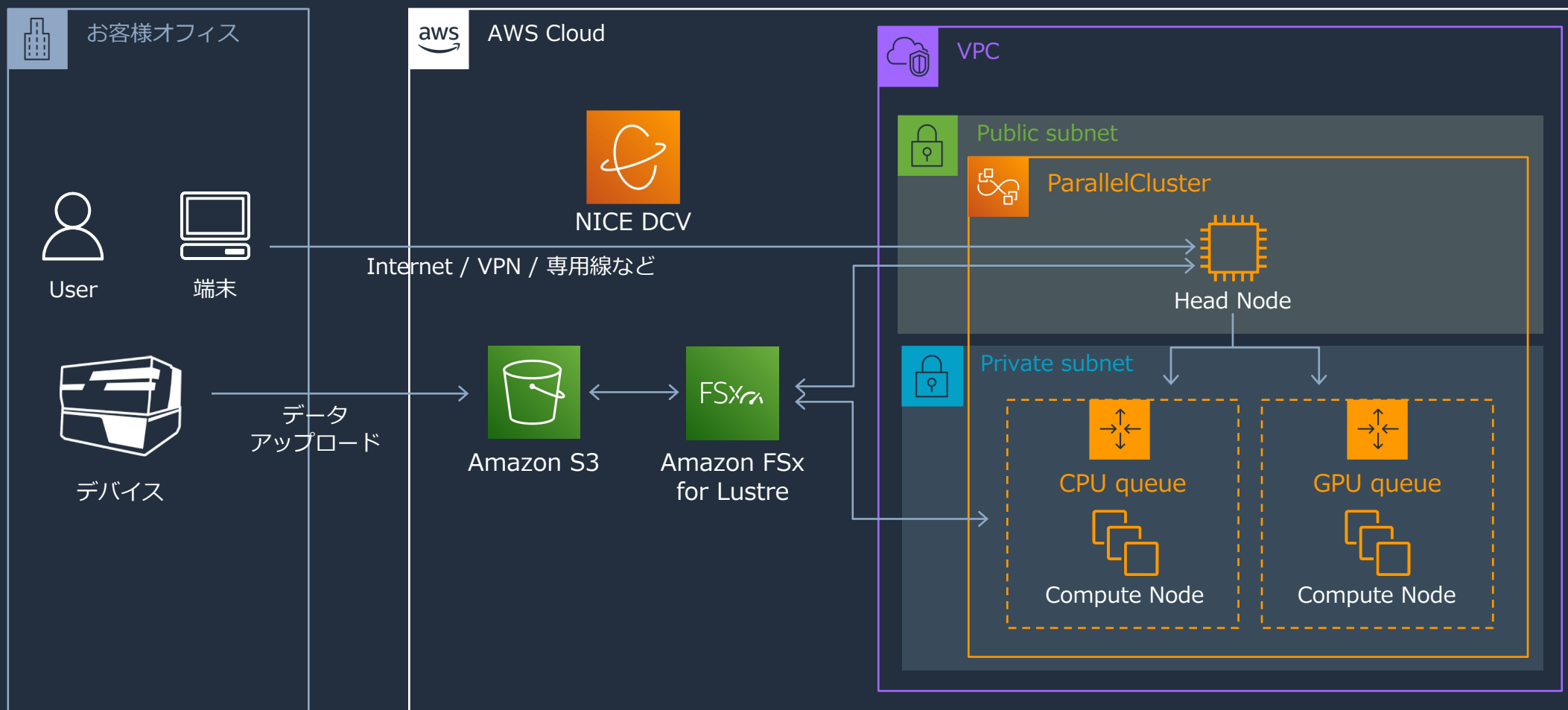
ユーザやタスク単位で専用のクラスタを構築できるため
要件や規模に合わせて、それぞれに最適なクラスタ構成可能

- CPUコア/メモリ
- ストレージ
- アクセラレータ
- ネットワーク
- インストールするソフトウェア



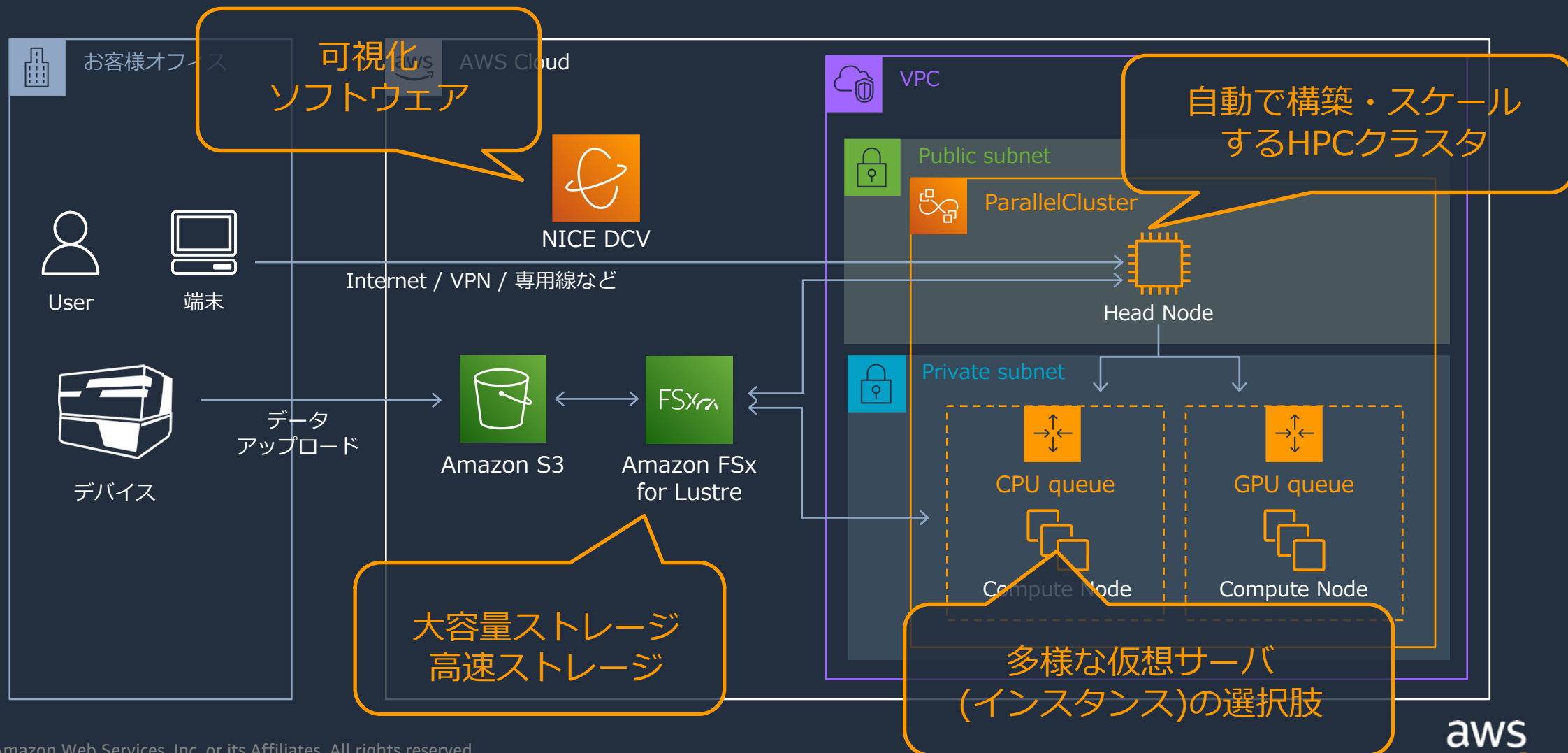
One size does not fit all!

AWSでのHPC構成例



<https://github.com/aws/aws-parallelcluster>
<https://slurm.schedmd.com/>

使い慣れた環境をクラウドで簡単に構成できる



Harvard Medical School

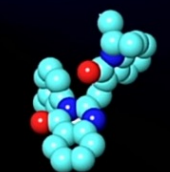
巨大スケールでのドッキングシミュレーション事例

創薬領域では、薬の候補となる化合物を発見するため、標的となるタンパク質と化合物の相互作用を予測するドッキングシミュレーションと呼ばれる手法が用いられる

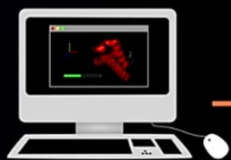
大量の化合物でのドッキングを試すことで薬剤候補分子の発見につながるが、そのために長大な計算時間が必要（10億化合物 × 1化合物あたり15秒 = 475年）

最大時 228万 vCPU を使用し、数十億化合物規模のドッキングシミュレーションを数時間で完了

Using hyperscale compute



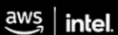
1 billion compounds



15 seconds per compound



475 years

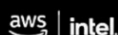
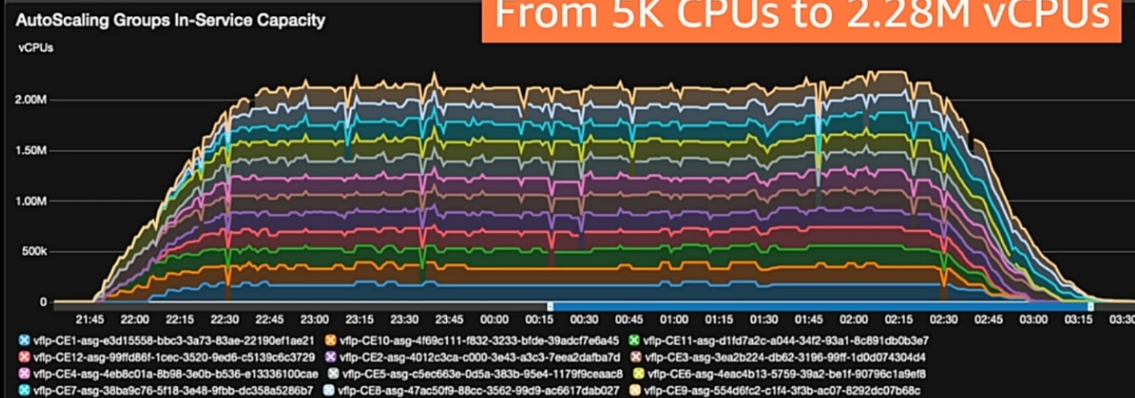


© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its affiliates. All rights reserved.



Learning from largest-ever known single Region HPC run on any cloud

From 5K CPUs to 2.28M vCPUs



© 2021, Amazon Web Services, Inc. or its affiliates. All rights reserved.



第一三共株式会社様での創薬化学研究プラットフォーム

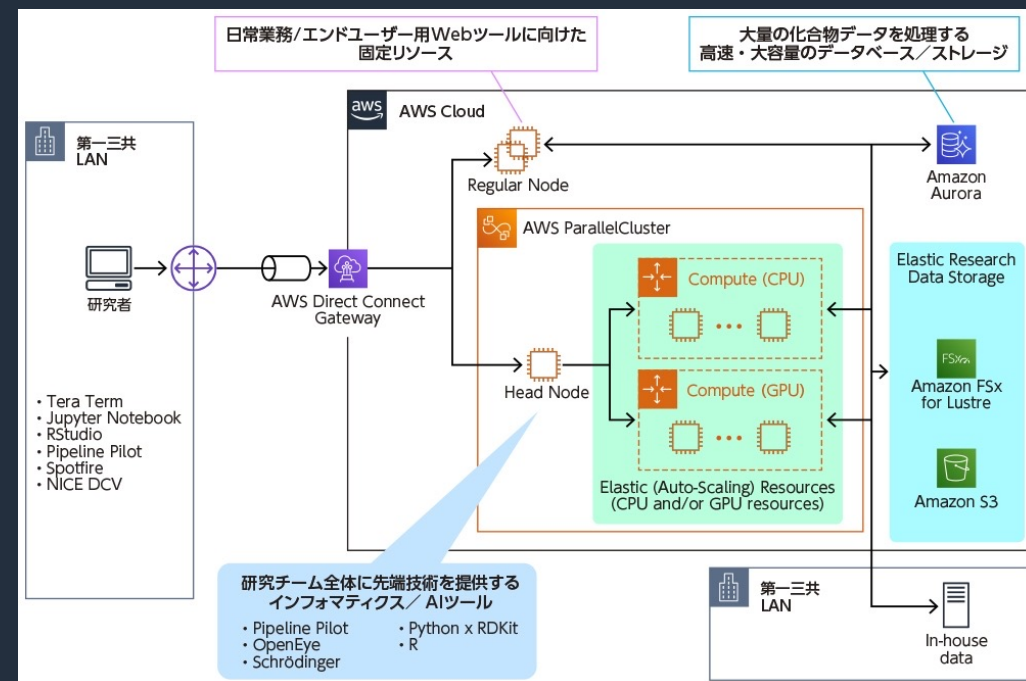
研究者のニーズを満たすプラットフォームを作る

- ①利用中の研究ツールやソリューションを使い続けられること
- ②計算処理ボリュームの変動に動的に対応できること

使い慣れた研究ツールや Web ツールから
プラットフォームにアクセスできる

使用しているツールの例：

Pipeline Pilot, OpenEye, Schrödinger,
Python x RDKit, R



『データで新薬開発を加速！第一三共「創薬化学研究プラットフォーム」の全容』, 日経クロステック Active

<https://active.nikkeibp.co.jp/atcl/sp/b/22/12/26/00828/>

計算機管理の手間を抑える

- ハードウェア保守
- ネットワーク管理/保守
- 電源管理
- 空調管理
- 設置場所の費用/運用

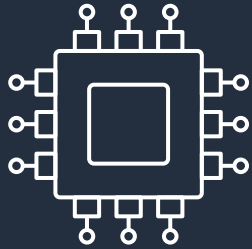
規模が大きくなればなるほど大変に。



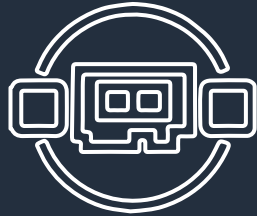
競争優位につながらない物理的管理はクラウドにお任せ
他社と差別化可能な部分に集中

Amazon Web Services の HPC への取り組み

AWS における主要な HPC 関連サービス



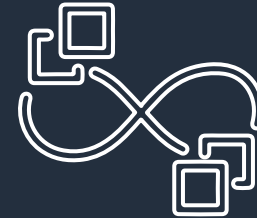
Amazon EC2



Elastic Fabric
Adapter (EFA)



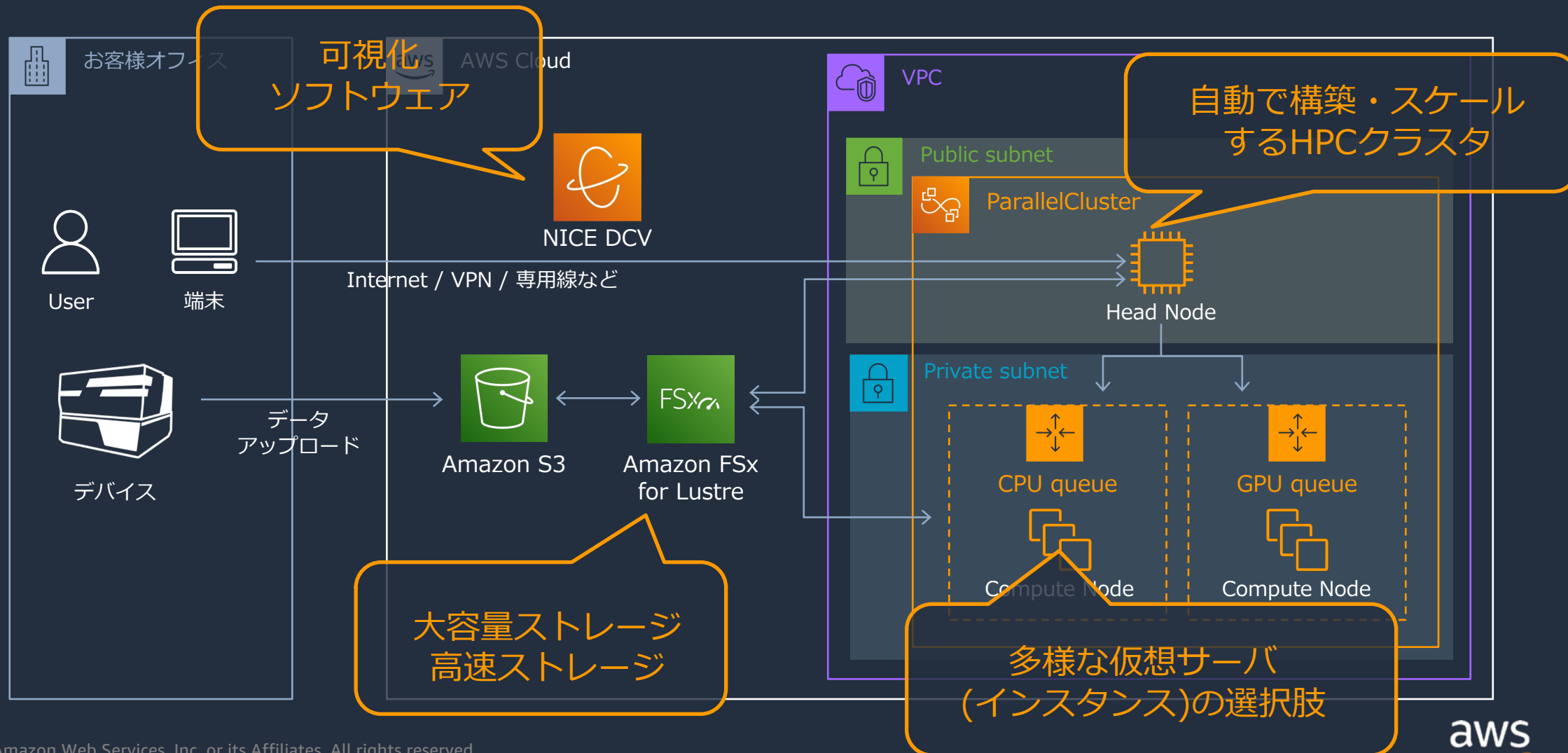
Amazon FSx
for Lustre

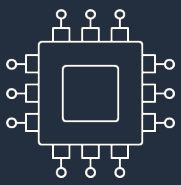


AWS
ParallelCluster

仮想サーバに加え、
高速ネットワーク、分散ストレージ、オーケストレーションなど
多様な HPC 関連 サービスを提供

(再掲) 使い慣れた環境をクラウドで簡単に構成できる





Amazon EC2 (Elastic Compute Cloud)

必要なときに必要な計算リソースを確保可能な仮想サーバサービス

- 数分で起動し、秒単位の従量課金（一部タイプについては1時間単位）
- 独自の仮想化基盤 AWS Nitro System により、仮想化オーバーヘッドを極小化
- ワークロードに応じて様々なインスタンスタイプを選択可能

高性能計算向けインスタンスタイプの例

高性能 CPU の選択肢

アクセラレータの選択肢



Intel Xeon processor
(x86_64 arch)

AMD EPYC processor
(x86_64 arch)

AWS Graviton Processor
(64-bit Arm arch)

NVIDIA GPU

Xilinx FPGA

Hpc6id インスタンス

Ice Lake

最大時全コア 3.5 GHz 駆動

R7iz インスタンス

Sapphire Rapid

最大全コア 3.9 GHz 駆動

Hpc7a インスタンス

EPYC GENOA

HPC特化

C6a インスタンス

EPYC Milan

最大 3.3 GHz 駆動

Hpc7g インスタンス

64bit Arm Neoverse V1ベース

AWS Graviton3E CPU 搭載

P4d インスタンス

A100 GPU 搭載

P4de インスタンス※

A100 (80GB版) GPU 搭載

G5 インスタンス

A10G GPU 搭載

P5 インスタンス

H100 GPU 搭載

F1 インスタンス

Virtex UltraScale+

VU9P 搭載

※ 2023年10月現在プレビュー提供中

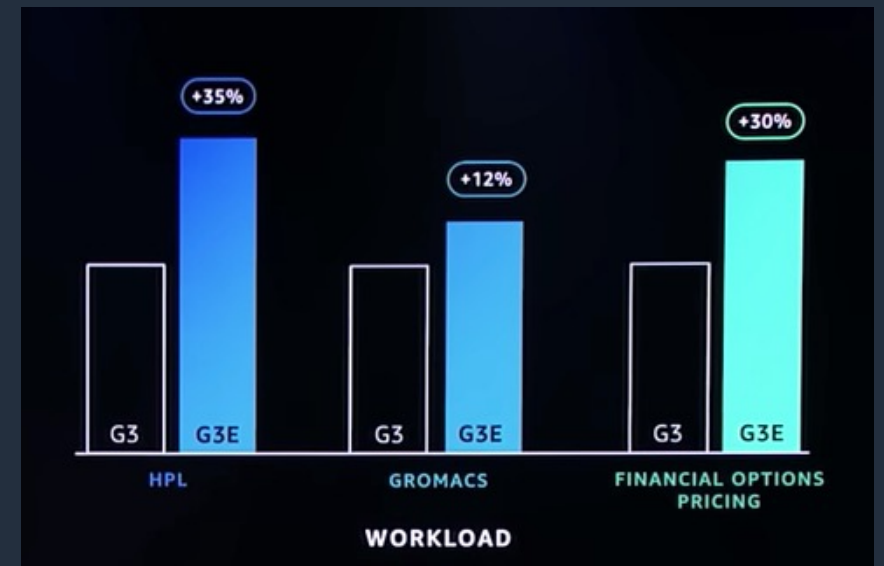
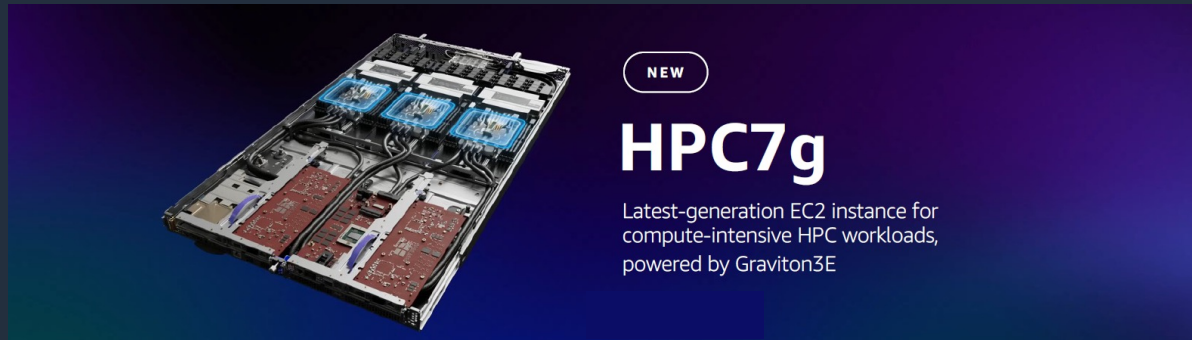


AWS Graviton3E / HPC7gインスタンス

2022年に発表された ArmアーキテクチャGraviton3 の派生型プロセッサ
HPC 向けに最適化 (浮動小数点演算、ベクトル演算に最適化)

Graviton3 と比較して最大35%の計算性能向上

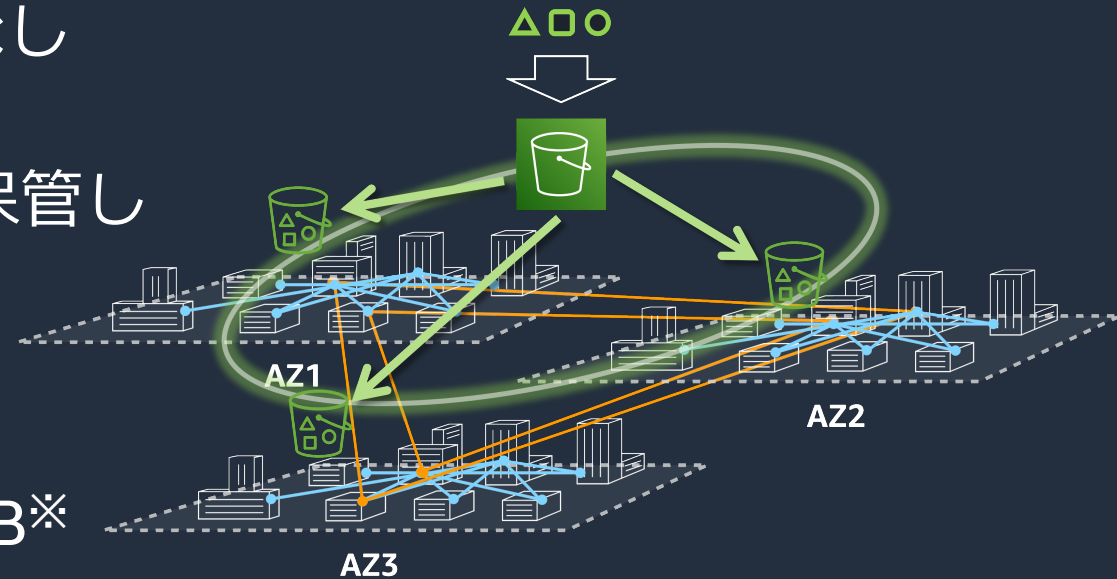
- ・ HPL (線形代数の並列計算ベンチマーク) : 35%性能向上
- ・ GROMACS(分子動力学シミュレーション) : 12%性能向上



Amazon S3

AWS の提供するオブジェクトストレージサービス

- 利用した容量に対する従量課金、容量制限なし
(1オブジェクトは最大5TBまで)
- データを3つ以上の AZ (データセンタ群) に保管し
99.9999999999% という高い耐久性
- 低コスト
Standard: 0.023 USD/GB※
～ S3 Glacier Deep Archive: 0.00099 USD/GB※
- スケーラブルで安定した性能であり、
ユーザが、サーバ台数、媒体本数やRAID、RAIDコントローラを考える必要がない



※2023年9月現在のus-east-1での価格
価格はストレージクラスによって異なる
<https://aws.amazon.com/jp/s3/pricing/>

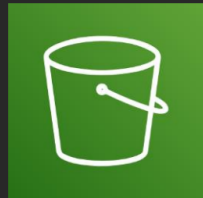
Amazon FSx for Lustre

高速な分散ファイルシステムである Lustre をフルマネージドで提供

Lustre は POSIX 準拠のファイルシステムとして利用可能

階層型ストレージの機能もあり、S3と透過的にデータの import/export が可能

Link your Amazon S3 data set to your Amazon FSx for Lustre file system, then...

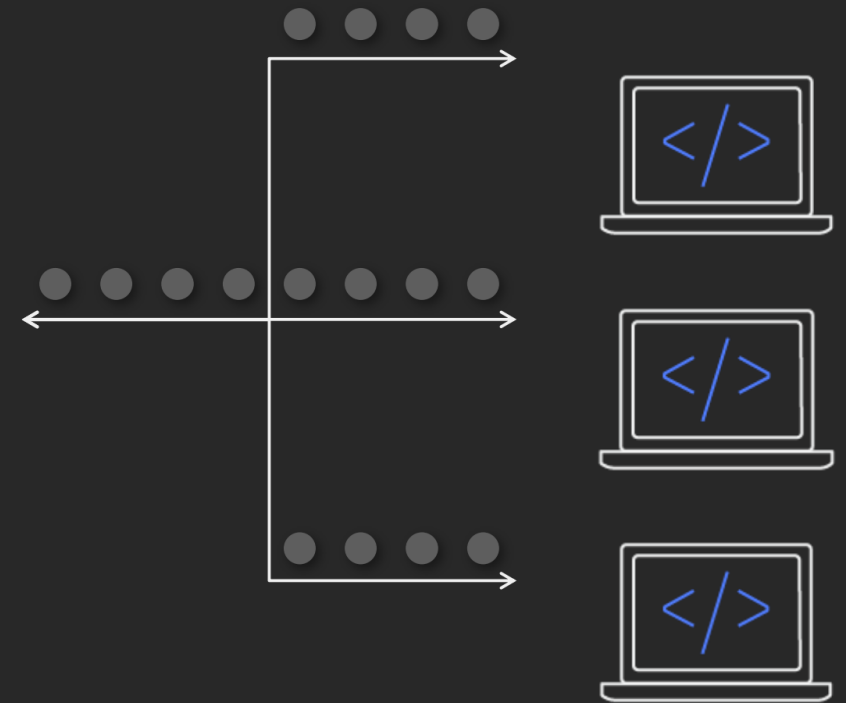


Data stored in Amazon S3 is loaded to Amazon FSx for processing



FSX 

Output of processing returned to Amazon S3 for retention



NICE-DCV

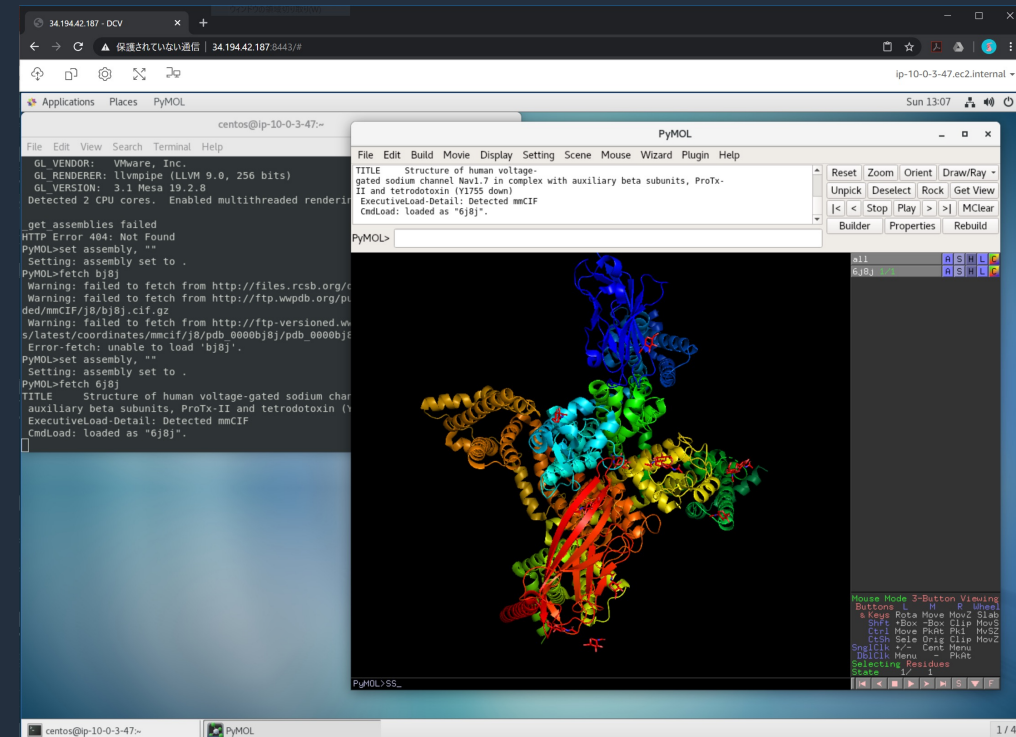
クラウド上のデスクトップ画面をストリーミングするためのソフトウェア

特徴

- 専用のプロトコルによる高速かつスムーズなストリーミング
- サーバはWindows、Linuxの両方に対応
- GPUにも対応し、G4dn/G4adインスタンス等を利用することでより高速な描画が可能
- ネイティブクライアントの他、HTML5対応ブラウザからも利用可能

コスト

- Amazon EC2で利用する場合はライセンスコスト無しで利用可能 (EC2以外での利用は有償)

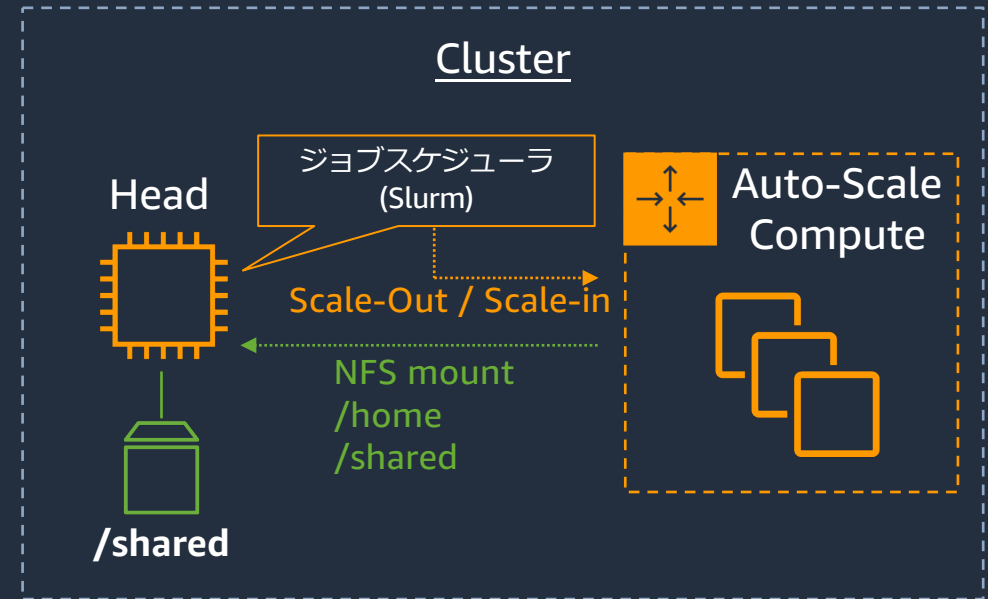


AWS ParallelCluster

数コマンド操作でジョブ投入に応じて自動でスケールするクラスタを
AWS 上に構築可能な AWS 公式のオープンソースソフトウェア

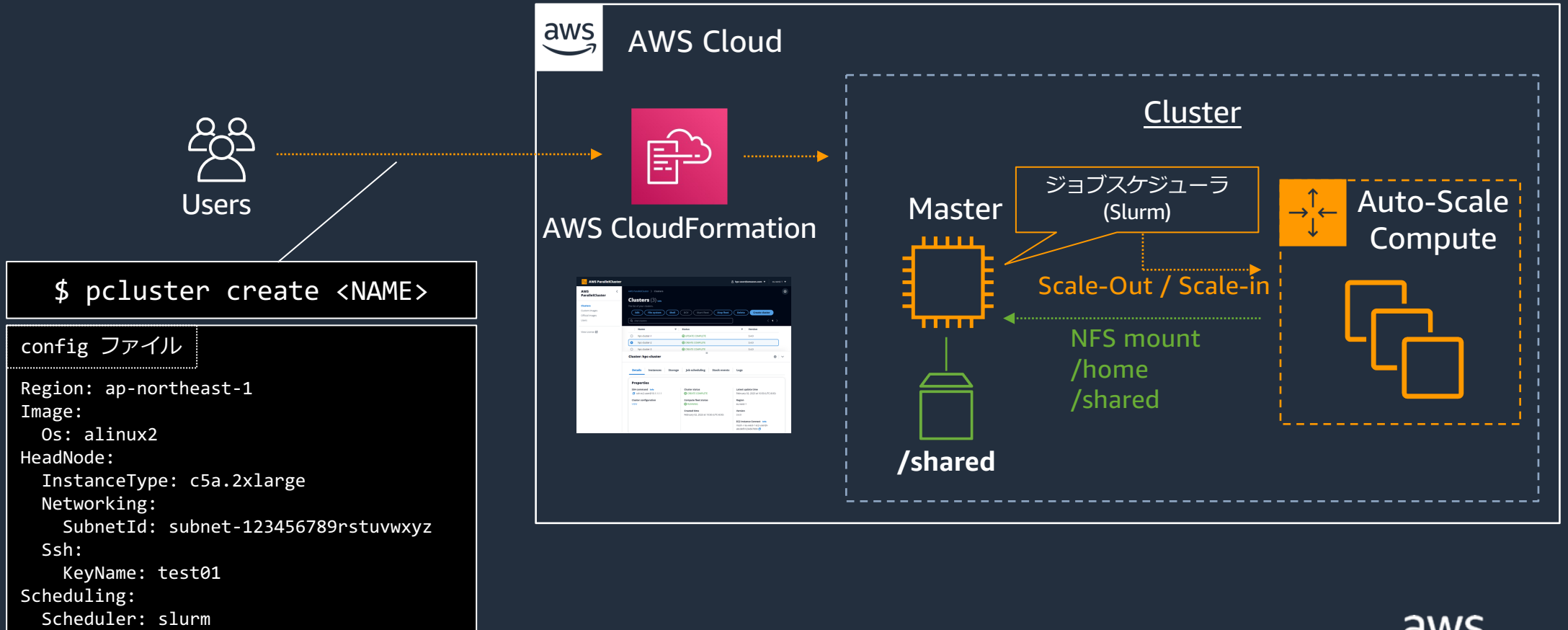
AWS ParallelCluster の特徴

- 既存の HPC 向けスケジューラ (Slurm) と連動し
スケーラブルな計算環境を作成
- MPI/NCCL 環境がセットアップ済み
- x86/Arm 両方の環境に対応
- 使用するOSやネットワーク環境、ストレージ構成などを柔軟にカスタマイズ可能
- オープンソースプロジェクトであり、誰でも
ソースコードを入手可能
<https://github.com/aws/aws-parallelcluster>
- コマンドラインツールに加え、ユーザーの AWS アカウント内
で展開可能なウェブツールも提供



AWS ParallelCluster の利用イメージ

自分のPC等に ParallelCluster ソフトウェアをインストールし、設定ファイルを記述、構築コマンドを実行することで、ジョブ投入に応じて Auto-Scale するHPCクラスタ環境が自動的に作成される

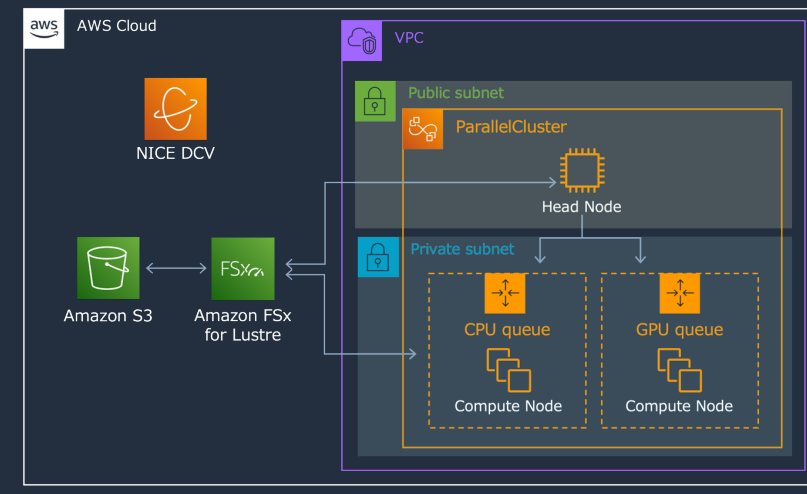
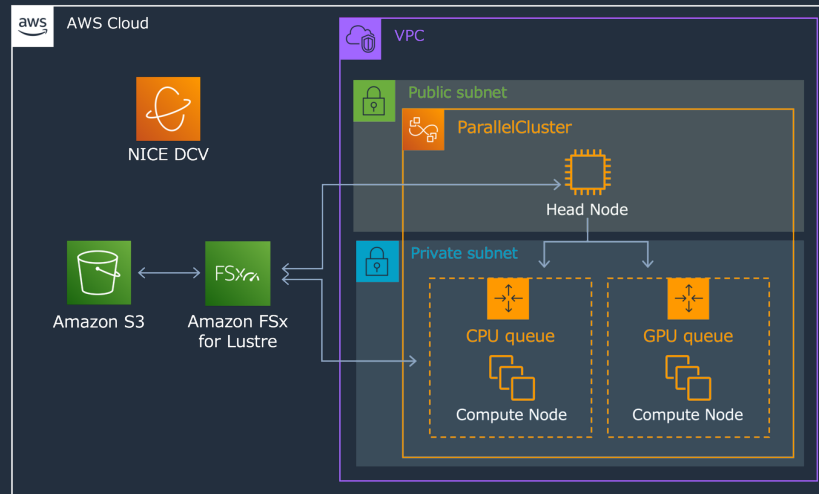


インフラ環境のポータビリティ

マシンのイメージ化や、Infrastructure as a Code (IaC) によって
同じ環境を複製したり、別のユーザーが容易に再現可能になる

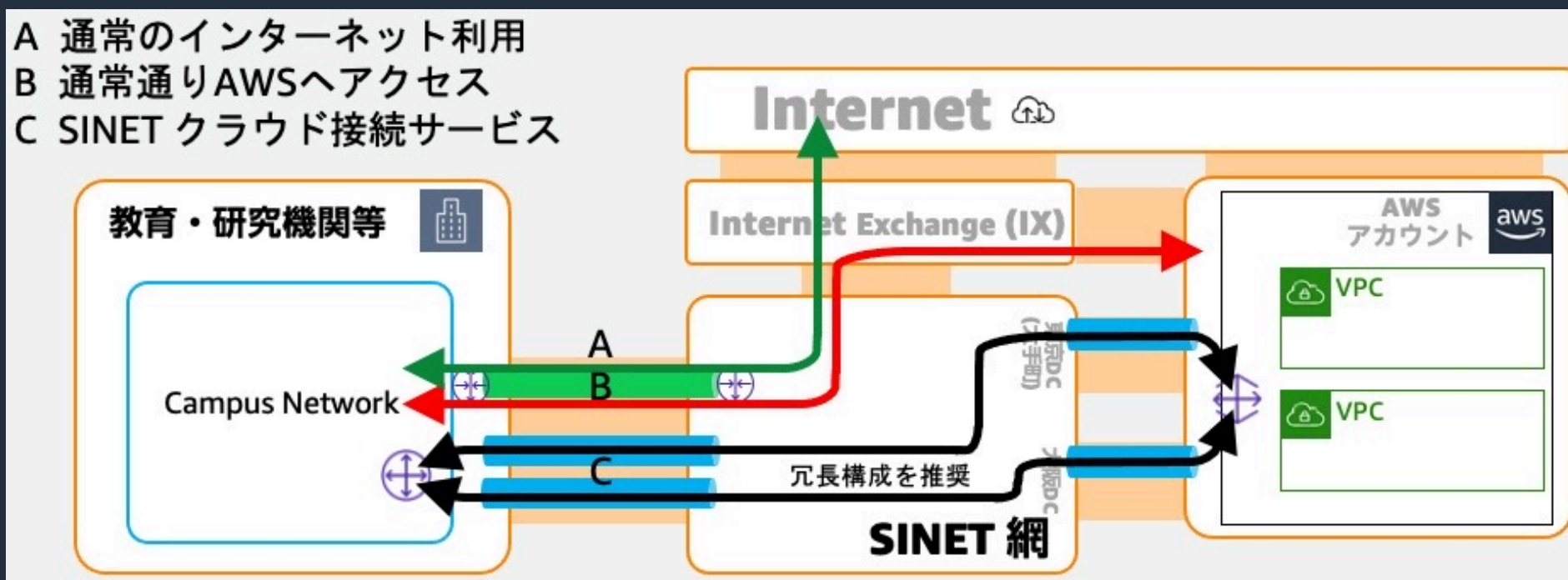
```
Region: ap-northeast-1
Image:
  Os: alinux2
HeadNode:
  InstanceType: c5a.2xlarge
Networking:
  SubnetId: subnet-
123456789rstuvwxyz
Ssh:
  KeyName: test01
Scheduling:
  Scheduler: slurm
```

テンプレートに基づき
各リソースが自動起動



SINET 経路による高速な AWS 接続

- SINET とAWSはIX(インターネットエクスチェンジ)で直接ピアリングしており、(経路A)
- SINET 経由で Internet を利用している機関は申請不要で高速な帯域を活用可能 (経路B)
- SINET クラウド接続サービスを利用することで「閉じた環境」での利用も可能 (経路C)
- 2022年12月より SINET AWS 間の接続に、**複数の 100 Gbps 専用回線を増強**

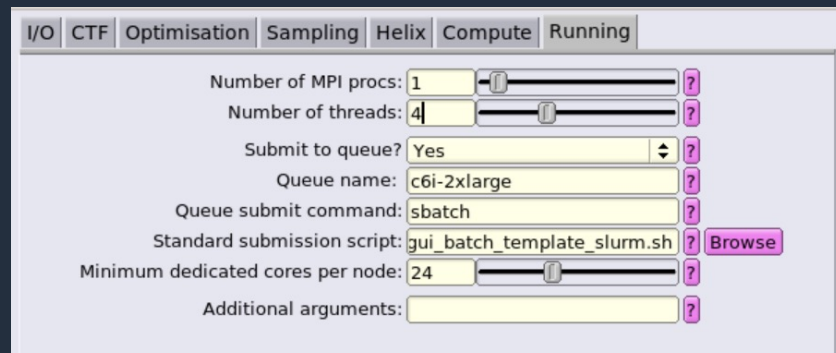


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/aws-sinet-osaka-dc/>
<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/sinet6-aws-ur/SIN>

創薬研究・開発での活用事例

CryoEM on AWS - Relion

- Relionはジョブスケジューラ連携機能があり、GUIフロントエンドからAWS ParallelClusterへのジョブ投入が可能
- 処理内容に応じてCPU/GPUの使い分けや高速なストレージの活用など柔軟な環境構築ができる



I/O CTF Optimisation Sampling Helix Compute Running

Number of MPI procs: 1
Number of threads: 4
Submit to queue? Yes
Queue name: c6i-2xlarge
Queue submit command: sbatch
Standard submission script: gui_batch_template_slurm.sh **Browse**
Minimum dedicated cores per node: 24
Additional arguments:

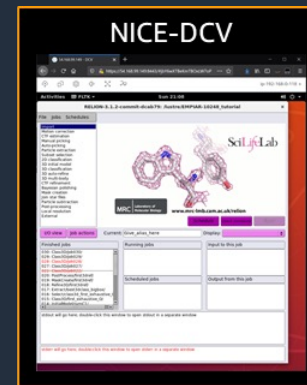
gui_batch_template_slurm.sh

```
#!/bin/bash
#SBATCH --ntasks=XXXmpinodesXXX
#SBATCH --cpus-per-task=XXXthreadsXXX
#SBATCH --partition=XXXqueueXXX
#SBATCH --error=XXXerrfileXXX
#SBATCH --output=XXXoutfileXXX

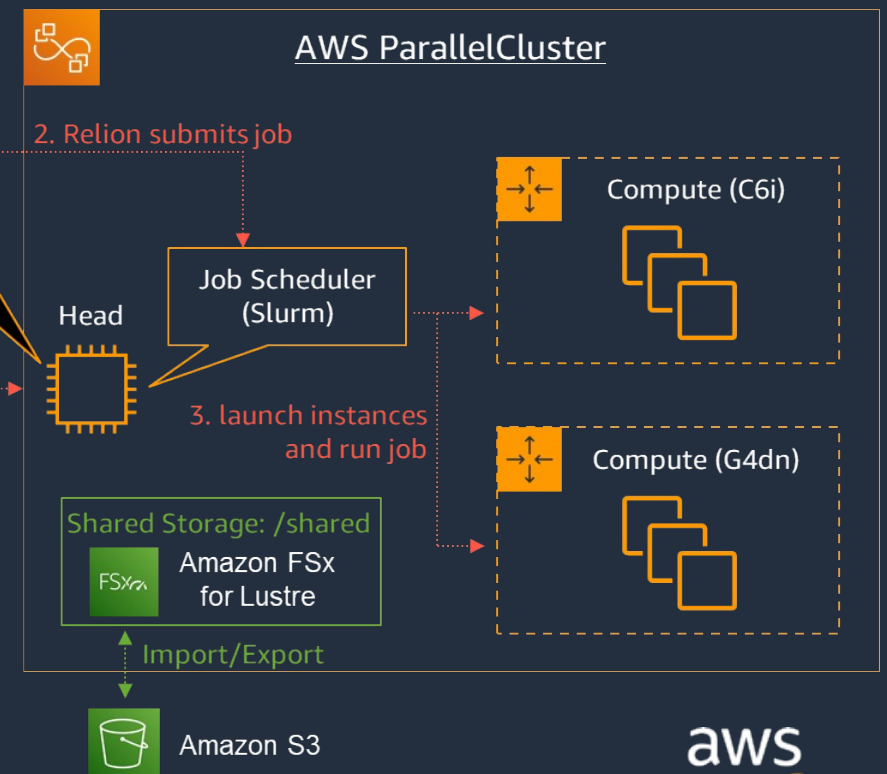
time mpirun XXXcommandXXX
```



Users



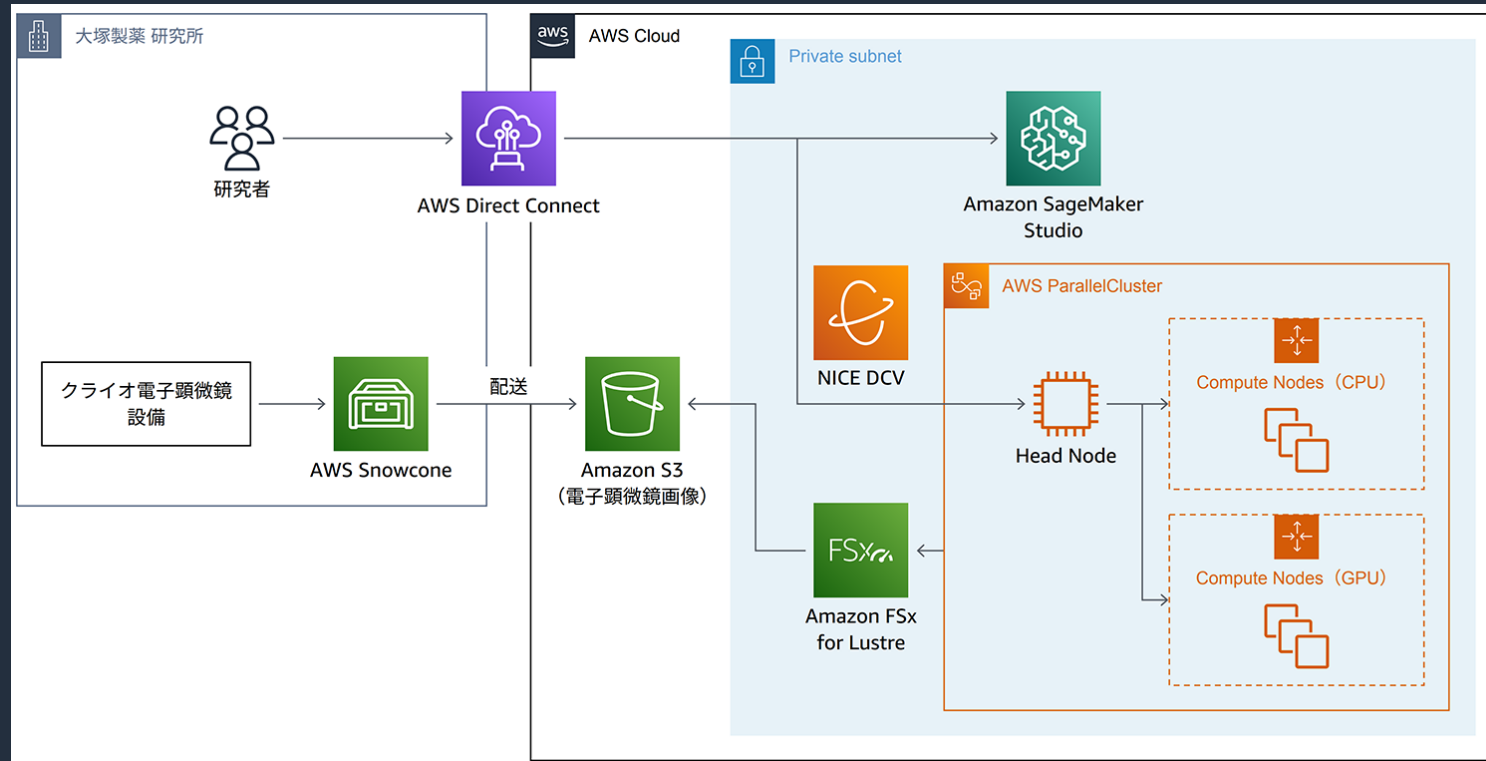
1. login with GUI via NICE-DCV



大塚製薬株式会社様での創薬プラットフォーム

創薬研究環境を AWS 上に構築し、多様な研究者からの要求に迅速に対応可能に

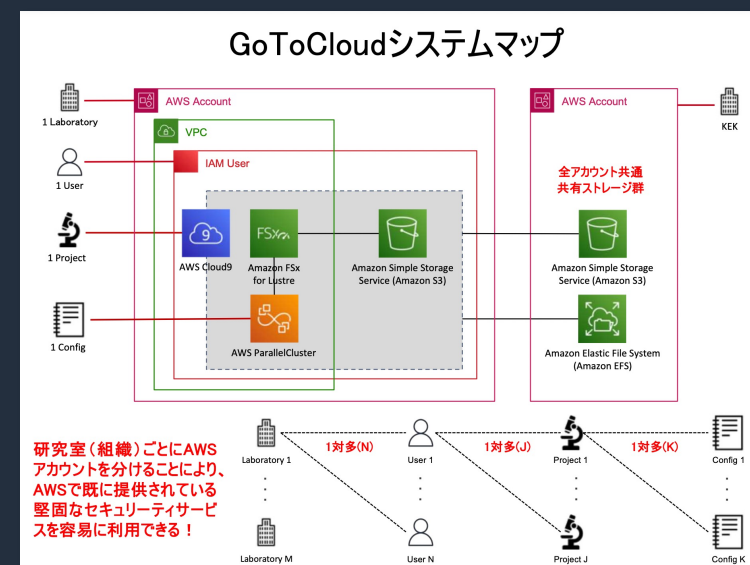
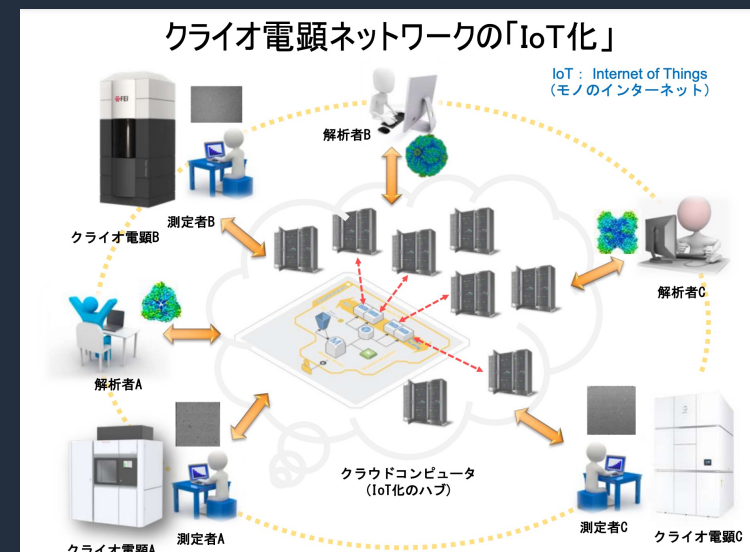
- クライオ電顕解析や機械学習（AlphaFold2）といったワークロードで活用
- 一週間で解析用クラスタを構築し、1処理の解析時間も7日から2～3日に短縮



<https://aws.amazon.com/jp/solutions/case-studies/otsuka-pharmaceutical-case-study/>

高エネルギー加速器研究機構(KEK)様 GoToCloudプラットフォーム

- クライオ電子顕微鏡から出力されるデータをAWSにアップロードしハブ化
- AWS HPCプラットフォームを利用することで、処理の高速化と管理コスト削減を実現
 - 処理内容に応じて適切なCPUやGPUを必要な時に必要な量を確保
 - タンパク質の構造解析計算の主要部分に要する時間について約7分の1の短縮を実現
- SINETを通じてデータ分析を行うことで、セキュアに産学連携ハブ/共通プラットフォームを実現



高エネルギー加速器研究機構(KEK)様 GoToCloudプラットフォーム

- KEK様が構築した解析環境を他の研究機関や製薬企業へ提供
- 最適化したHPC環境をAWS ParallelClusterを用いて、ユーザーのAWS環境内に展開することで各機関での解析を支援

The screenshot displays a video call interface on the left with four participants: @booffa in London, Toshio Moriya (KEK), Yusuke Yamada (KEK), and an unnamed participant. On the right, a slide titled "KEK GoToCloud data analysis platform" illustrates the architecture. The slide shows an "AWS Cloud" environment where KEK's infrastructure (Amazon EFS and Amazon S3) is shared with multiple users (User A and User B). Each user has their own AWS ParallelCluster and Amazon S3 bucket for "Measured data" and "Data analysis results". KEK's infrastructure includes "Data analysis software", "Scripts", and "Configuration". A caption at the bottom states: "KEK does not need to take care about user's data security and costs so much."

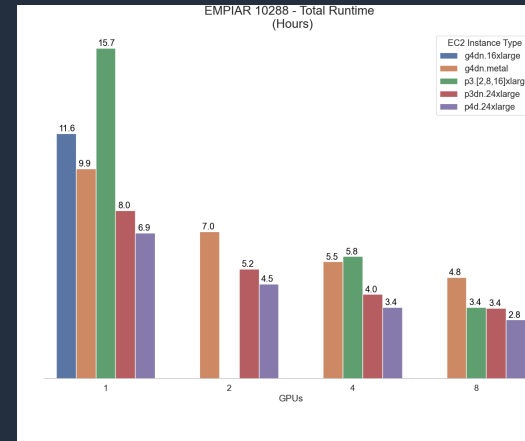
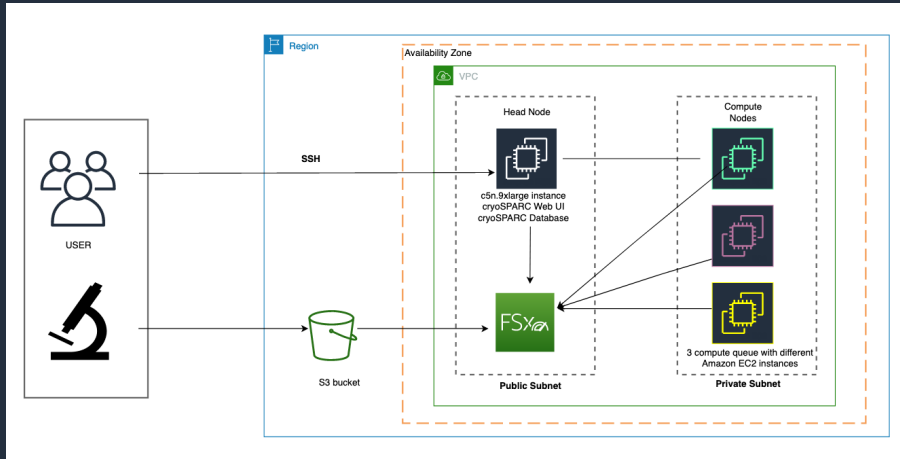
<https://www.youtube.com/watch?v=rdF1AzfadOY&t=595s>

CryoEM on AWS - CryoSPARC

- CryoSPARC公式サイトに AWS ParallelCluster を用いるための利用ガイドやベンチマーク結果を公開

<https://guide.cryosparc.com/deploy/cryosparc-on-aws>

<https://guide.cryosparc.com/deploy/cryosparc-on-aws/performance-benchmarks>



- Thermo Fisher Scientific社の事例としてAWS上でのHPCを構築し、ジョブを実行するためのソリューションを掲載

<https://assets.thermofisher.com/TFS-Assets/MSD/Reference-Materials/pharma-cryosparc-wp0028.pdf>

<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/how-thermo-fisher-scientific-accelerated-cryo-em-using-aws-parallelcluster/>

理化学研究所 計算科学研究センター様 バーチャル富岳プロジェクト

- 富岳 = Arm CPU(A64Fx)で構成されるフラッグシップスーパーコンピュータ
- 富岳で開発されたアプリケーションやソフトウェアスタックをAWS Graviton3インスタンス上に展開

- **富岳アプリケーションの幅広い活用**

- 企業が富岳の「成果」を活用しやすくなる
- 利用者の裾野を拡大できる
- Arm HPC エコシステムの拡大できる



出典：2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
「「バーチャル富岳」：「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

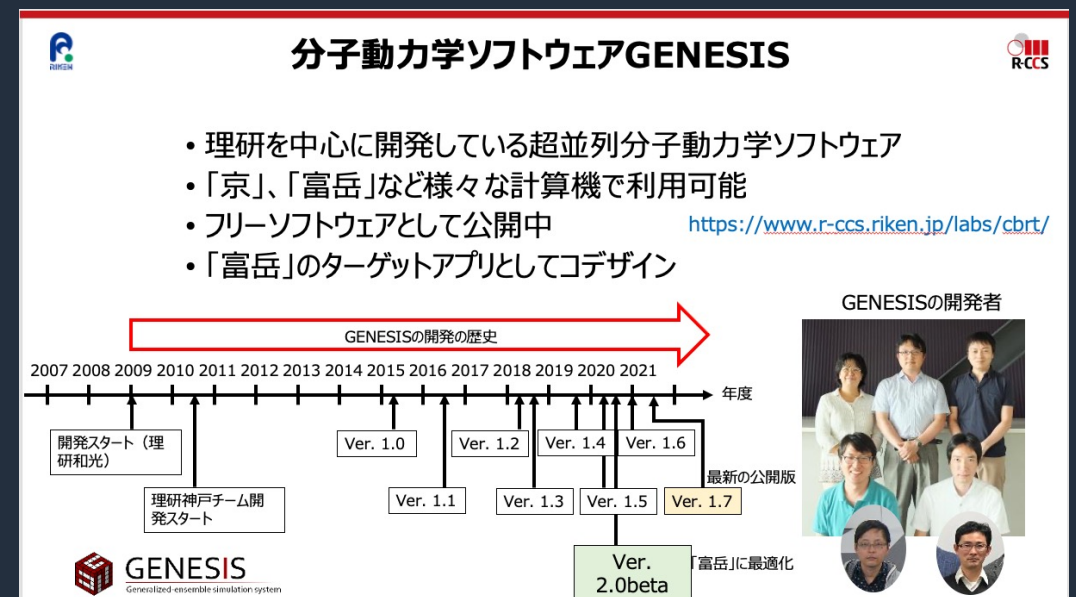
理化学研究所 計算科学研究センター様 バーチャル富岳プロジェクト

分子動力学ソフトウェア GENESIS

- 理化学研究所が中心として開発した国産の超並列分子動力学ソフトウェア
- 様々なHPCアーキテクチャに対応

AWS Graviton 3環境での検証

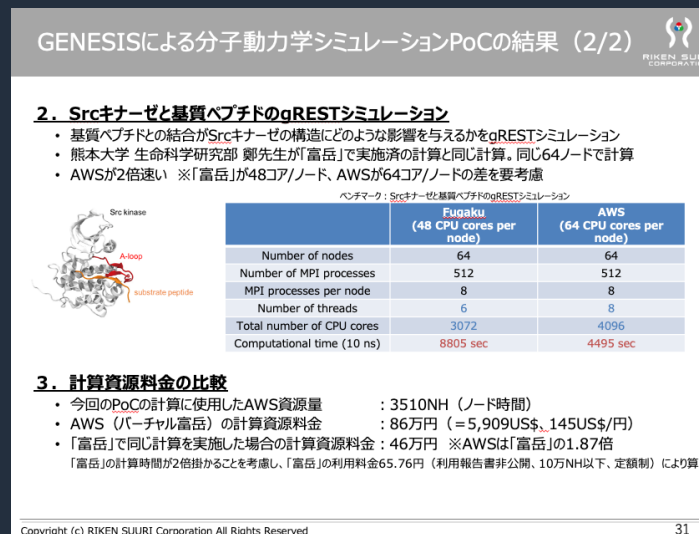
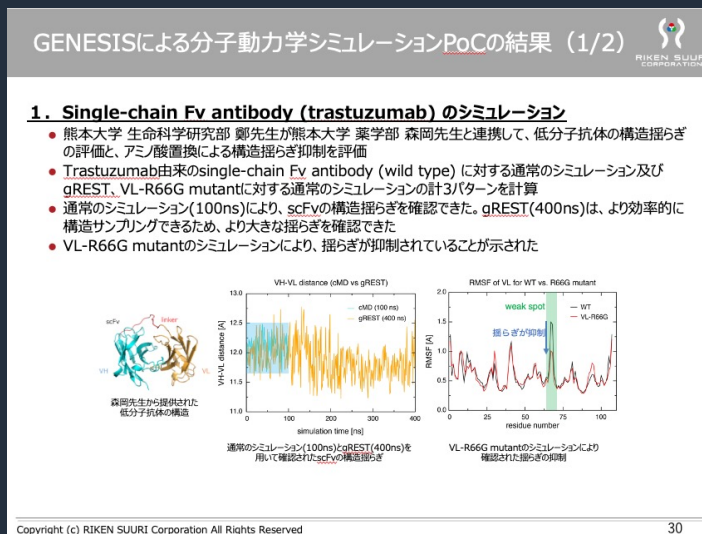
- HPC環境構築、ソフトウェアスタックを整備
- アプリケーションのポーティング・Graviton向けのチューニング
- 実利用を想定したユースケースを選定し、有効性を検証



出典：2023年8月24日 理化学研究所 計算科学研究センター 松岡センター長 講演資料
「バーチャル富岳」：「富岳」の成果を広く流布し、スパコンの利用環境の革新・標準化を目指す」

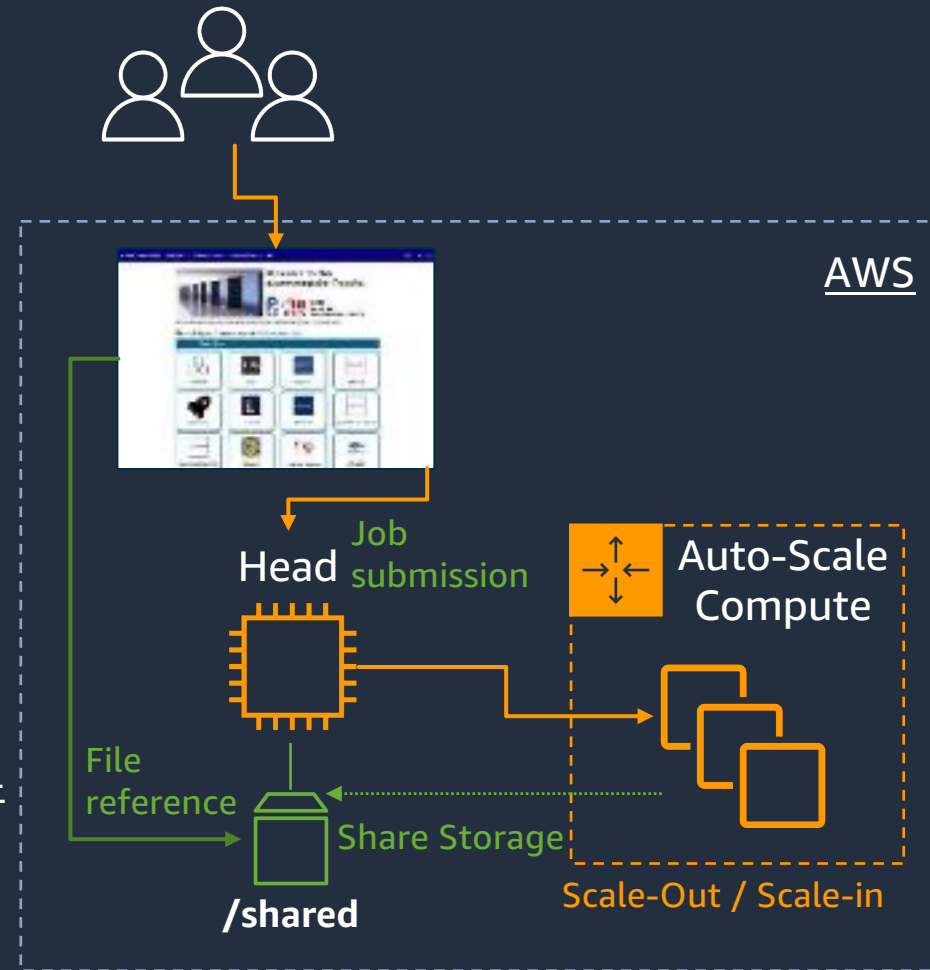
理化学研究所 計算科学研究センター様 バーチャル富岳プロジェクト

- 熊本大学様にてAmazon HPC7g環境でGENESISを走行・評価
- 富岳と比較して高い計算性能を確認できた
 - 処理速度：AWS環境が2倍速い
 - 価格：富岳利用費より1.8倍高い (オンデマンド価格による試算)
- **AWSリソースの購入方法を工夫することで価格は低減可能**



理化学研究所 計算科学研究センター様 バーチャル富岳プロジェクト

- 株式会社理研数理が商用サービスとしてGENESISを実行可能なAWS環境と利用サポートを提供
 - GENESIS環境が構築されたAWSインスタンスを利用
 - 富岳に整備されているGUI (Fugaku OnDemand) により「富岳」と同じ使い勝手を実現
- AWSで「富岳」と同様に利活用可能
 - 富岳でR&D → 秘匿性の高い開発時にAWSに移行
 - AWS上で富岳環境を試行 → ステップアップで富岳に移行
超大規模計算を実行する



出典：2023年9月22日株式会社理研数理 松崎様講演資料
『バーチャル富岳の取り組み、その展開されるサービス』

まとめ

- クラウド活用により研究・開発におけるインフラ面のボトルネックを解消でき、製薬企業・研究機関で活用いただいている
- AWSでは計算リソース・ストレージサービスを簡単にクラスタ構築できるため、様々なワークフローに対応できる
- 以下の活用事例をご紹介した
 - AWS HPCを使ったクライオ電子顕微鏡ワークフローの活用
 - 創薬アプリケーションGENESISのAWS移行と今後の展望

Thank you

