

## 創薬研究におけるクラウド活用 Drug discovery research in the cloud

宮本 大輔  
Daisuke Miyamoto  
宇都宮 聖子  
Shoko Utsunomiya

アマゾン ウェブ サービス ジャパン株式会社 技術統括本部  
Amazon Web Services Japan K.K.

近年の創薬開発では、薬剤のモダリティの増加に伴い、計算機シミュレーションなど多種多様で大規模なコンピューティング環境に大きな期待が寄せられている。また、研究機器の多様化や高度化により、大規模なデータ管理や国内外での共同研究への需要も増加している。

このような状況の中で、必要な時に必要な量の計算リソースを確保することができるクラウドコンピューティングを用いた大規模計算基盤活用が注目を集めている。クラウド上では、HPC (High Performance Computing)・量子コンピュータ・データ分析・機械学習・ネットワーク・セキュリティ等の目的に特化した様々な機能が提供されており、企業・アカデミアをまたいだ大規模な共創環境をスムーズに構築することができる。本講演では、このような創薬研究におけるクラウド活用の例として、Amazon Web Services (AWS) における、HPC と 量子コンピュータへの取り組みを中心に紹介する。

### AWS における HPC

HPC 領域では、大規模なバーチャルスクリーニングや、ゲノム解析、クライオ電子顕微鏡による単粒子解析といった幅広い分野で AWS の活用が行われている。AWS では、多様な CPU の選択肢に加え、GPU や FPGA についても従量課金で利用できるため、目的のアプリケーションに適したクラスタを必要に応じて作成することが可能だけでなく、AWS ParallelCluster や AWS Batch といったサービスにより、HPC クラスタ環境の構築も迅速かつ柔軟に行えるため、多様なユースケースに対応することが可能になっている。本セッションでは、これらの HPC 関連サービスの概要に加え、実際に製薬企業や研究機関でどのように活用されているか、国内外での事例を交えて紹介する。

### AWS における量子コンピュータ

創薬研究における新たなアプローチとして、量子コンピュータの活用が注目されている。

AWS では、量子コンピュータのフルマネージドサービスである、Amazon Braket を提供しており、AWS アカウント持っていれば誰でも IonQ, Rigetti, D-Wave といった量子コンピュータや量子回路シミュレータにアクセスできる環境が整っている。量子コンピュータの研究開発はこれまで、ハードウェアやアルゴリズムの開発において、学術的にも工業的にも非常に高度な技術と知見を要求されるため、限られた研究組織でしか取り組むことができなかったが、クラウドを経由した一般向けの量子技術提供が進み、より多くの研究者や開発者が量子コンピュータ研究に参入できる時代に突入している。本セッションでは、創薬に関わる量子化学計算や量子機械学習など最近の量子コンピュータ研究開発の潮流と Amazon Braket で実現できることについて紹介する。