

## 新薬創出におけるクラウド活用の取り組み

Amazon Web Services では、HPC (High Performance Computing) やデータ分析、機械学習など様々な目的に適合する200を超えるサービスを提供しており、さらにこれらを組み合わせることで、研究者が自身の目的に適した研究環境の構築を行うことが可能となる。本セッションでは AWS の概要に加え、実際に創薬研究におけるクラウド活用の実例として、中外製薬株式会社 荒川晶彦様、角崎太郎様、西藤ゆかり様より、AI や分子シミュレーション、NGS 解析といった領域での活用についてご紹介いただく。

### AWS で実現する研究者のための創薬研究基盤

原田 裕平

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

AWS のクラウドサービスを活用することで、研究者の IT リソースに関わる煩わしい手間を排除し、価値創造にフォーカスした研究基盤を構築することができる。AWS では、特定のユースケースに対する 1 コンポーネントとして利用可能なサービスが数多くあり、これらを上手く組み合わせることで、多種多様な研究者のニーズを満たす研究基盤を少ない労力で実現することができる。この考えを **Building Block** と呼んでいる。さらに HPC においては、スケラブルなクラウドの特性を活用し動的に計算リソースを用意することで、計算機クラスタの台数の制約から生じるスケジュール調整や突発的な計算ニーズに対して待ち時間を生じさせることなく、必要な際に必要な量のリソースを確保することが可能となる。本セッションではまず、AWS の各サービスの基本的な概要や、HPC クラスタ環境を素早く実現する方法、ジョブの投入に応じて自動でコンピューティング基盤が立ち上がり処理が行われるオーケストレーションサービスである AWS Batch の紹介を行う。続けて **Building Block** を組み合わせた解析の例として、煩雑で工数がかかる前処理をワークフローとして定義することにより、高スループットを実現する解析自動化アプローチを紹介する。また、その環境をテンプレート化する事で、必要な解析環境をオンデマンドで迅速に立ち上げる方法も紹介する。

## 中外製薬の創薬研究における AWS 活用事例紹介

荒川 晶彦<sup>1</sup>、角崎 太郎<sup>2</sup>、西藤 ゆかり<sup>2</sup>

中外製薬株式会社

<sup>1</sup>創薬化学研究部 先端計算化学グループ

<sup>2</sup>創薬基盤研究部 データサイエンスグループ

中外製薬では「Chugai Digital Vision 2030」を掲げ、デジタル技術によってビジネスを革新し、社会を変えるヘルスケアソリューションを提供するトップイノベーターとなることを目指している。その基本戦略の1つとして「デジタルを活用した革新的な新薬創出」を設定し、創薬プロセスの革新・開発プロセスの革新・患者アウトカムの可視化を進めている。今回、創薬プロセスの革新に向けた取り組みの中で、AWSを活用した事例を2例紹介する。1例目は計算化学を活用した創薬における事例で、AWS Batch を採用して AI や分子シミュレーション関連の大規模計算を効率的に実行できるコンピューティング環境について紹介する。2例目は NGS 解析などの Bioinformatics における活用事例で、ワークフロー言語を採用して実験⇒解析⇒解釈をシームレスにつなぎ、Wet と Dry の研究員が利用できる解析プラットフォームについて紹介する。

AWS ヘルスケア・ライフサイエンスのご紹介ページ：

<https://aws.amazon.com/jp/local/health/>

お問い合わせ先：<https://aws.amazon.com/jp/contact-us/>

