



HPC on AWS

PCCC HPC クラウド部会

アマゾンウェブサービスで考える クラウド HPC アーキテクチャ

Daisuke Miyamoto

Sr. Specialist Solutions Architect, Compute/HPC
Amazon Web Services Japan G.K.

2023/10/04

宮本 大輔, Ph.D.

アマゾン ウェブ サービス ジャパン 合同会社
技術統括本部
シニアスペシャリストソリューションアーキテクト

製薬・金融・気象といった分野を中心に
AWS 上で大規模な計算を行われるお客様の技術支援を担当



本日のテーマ

実際にクラウド HPC を活用いただいている事例を通じて
クラウド HPC の現状や、メリット・デメリットについて
議論を深めることができれば

Agenda

- クラウド HPC の考え方
- AWS のクラウド HPC 関連サービス
- AWS のクラウド HPC アーキテクチャ

クラウド HPC の考え方

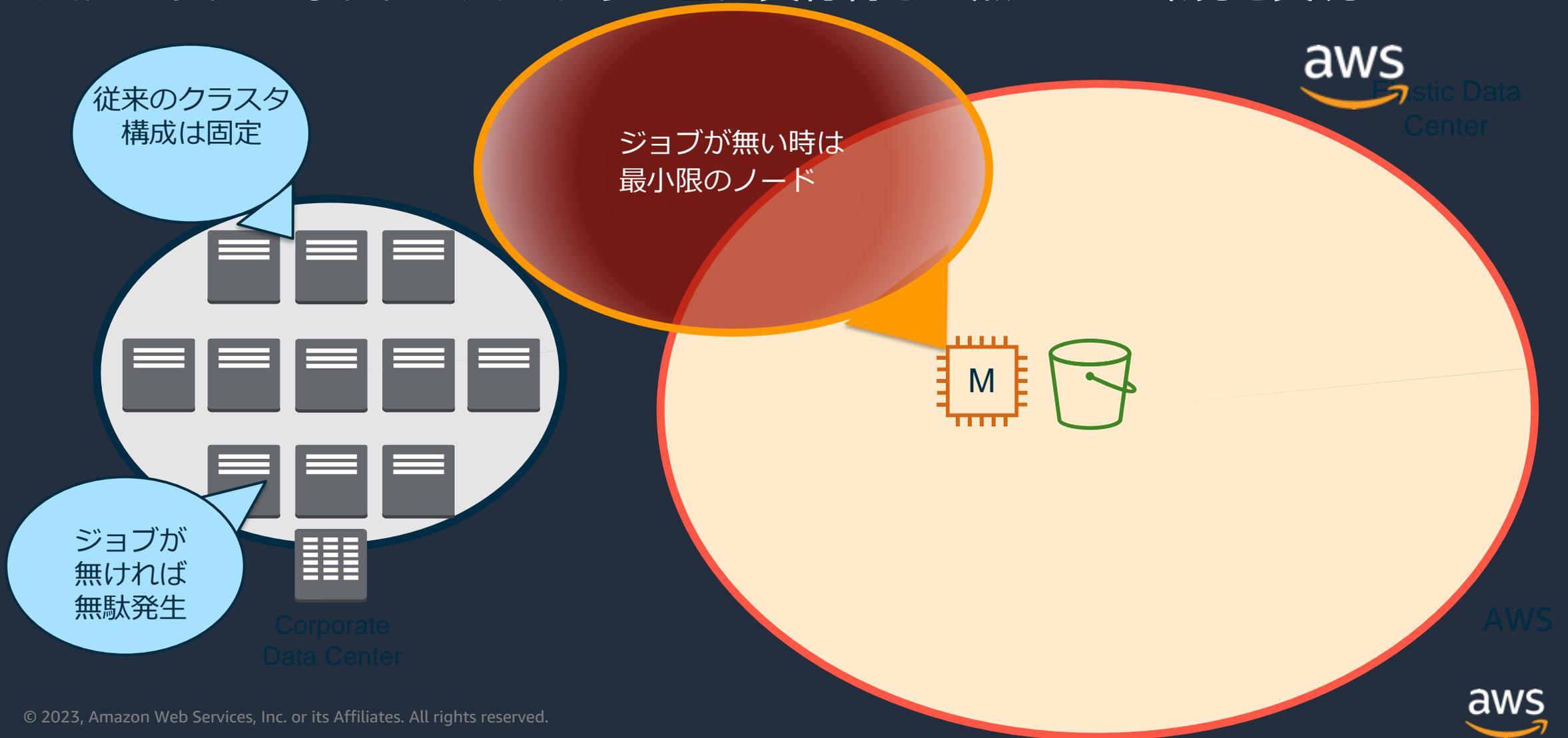
クラウド / クラウド HPC とは？

クラウドでは
需要に応じてリソースを増減できる「**拡張性**」に加え、
多様なワークロードに対応するための「**柔軟性**」や、
「**豊富なサービス**」が提供されており
これらを組み合わせて活用することができる

クラウドの持つ、このような特性を HPC に活用し、
より効率的に課題を解決する

必要な時に必要なだけ利用

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



必要な時に必要なだけ利用

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



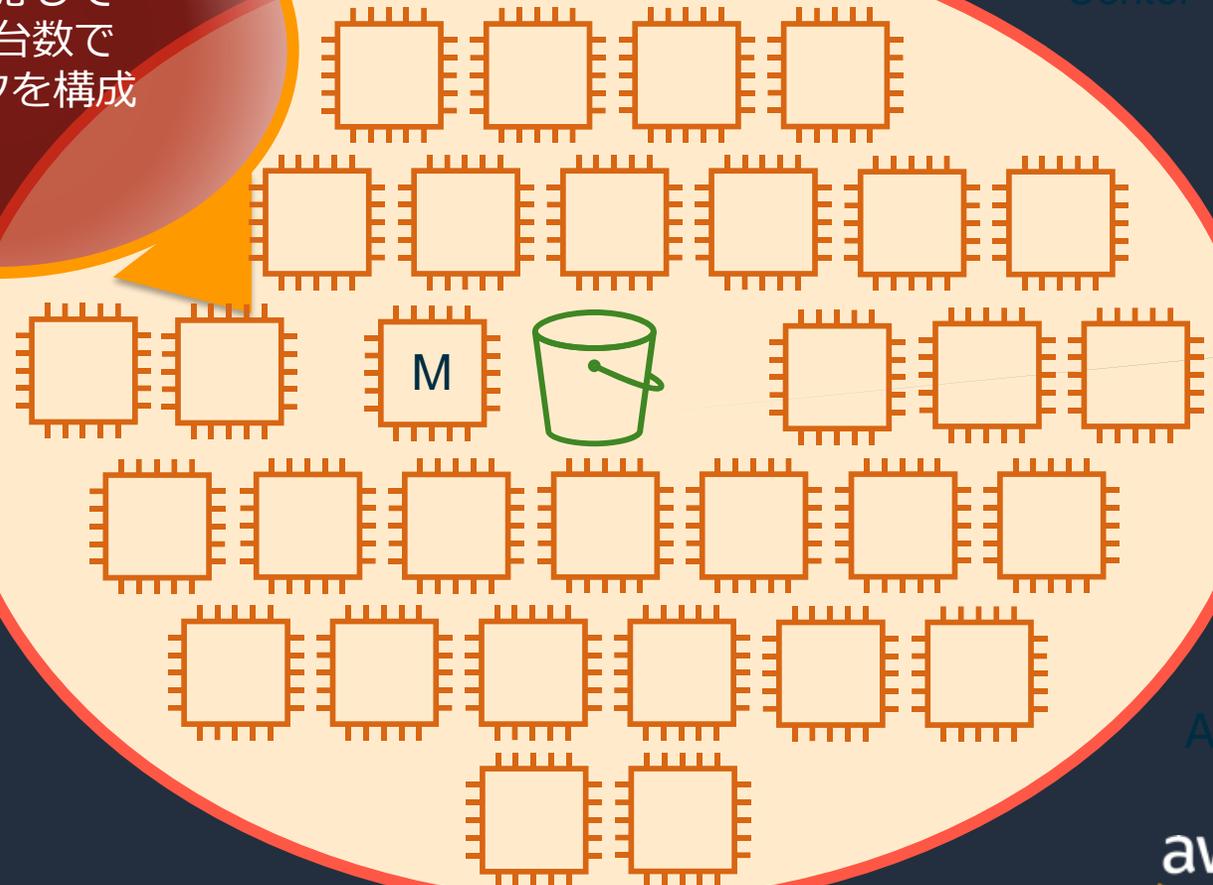
従来のクラスタ
構成は固定



ジョブが
無ければ
無駄発生

Corporate
Data Center

必要に応じて
必要な台数で
クラスタを構成



AWS

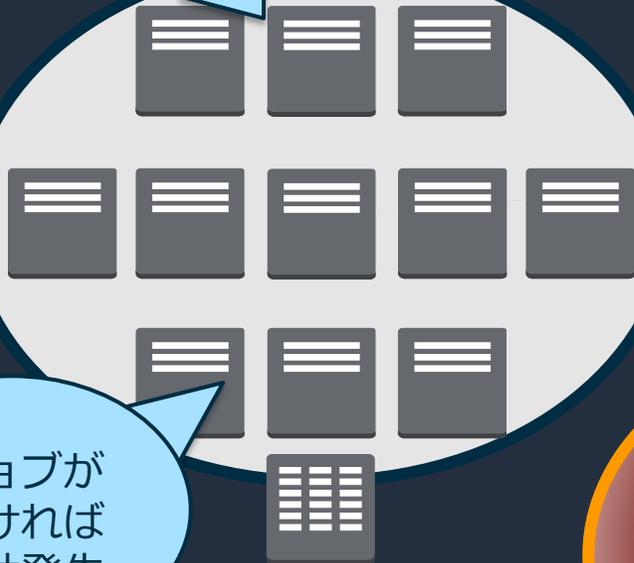


必要な時に必要なだけ利用

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



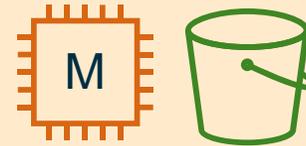
従来のクラスタ
構成は固定



ジョブが
無ければ
無駄発生

Corporate
Data Center

処理が終了すると
インスタンスを終了
課金停止



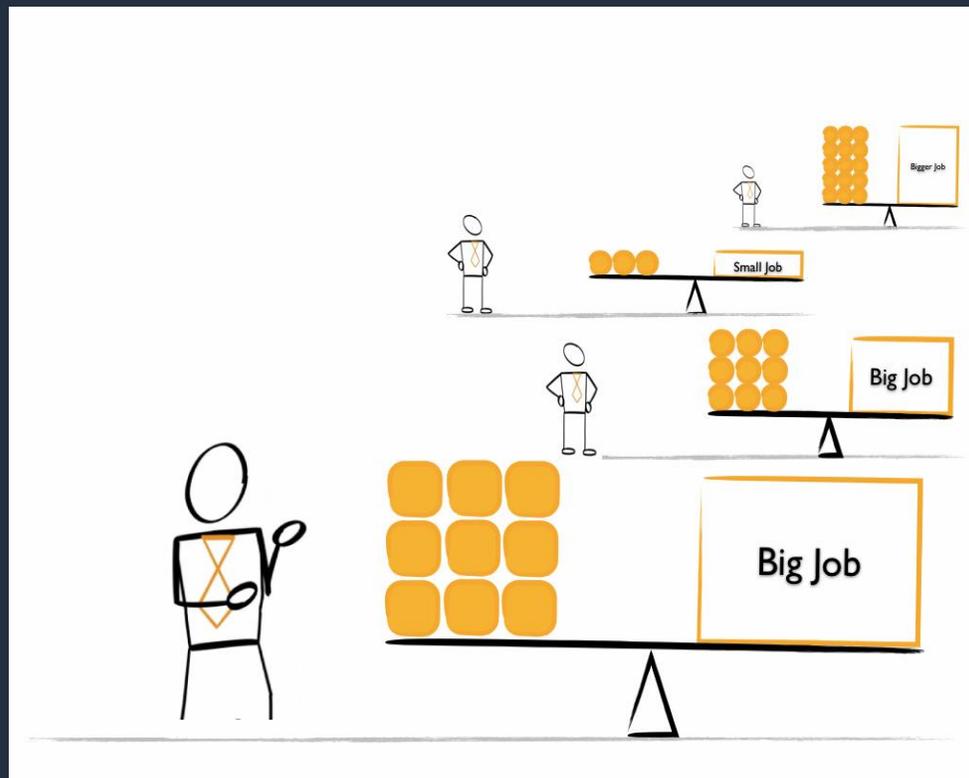
AWS



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、最適構成のクラスタを作成可能

- 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!

マネージドサービスの活用と Building Block の考え方

多くのクラウドでは、仮想サーバだけでなく、ユーザーが共通に利用するような

- ストレージ
- コンテナプラットフォーム
- データベース
- データレイク、データウェアハウス
- HPC クラスタ

といったサービスを提供している

これらのサービスを適材適所で組み合わせ、やりたいことを最小の手間で実現する

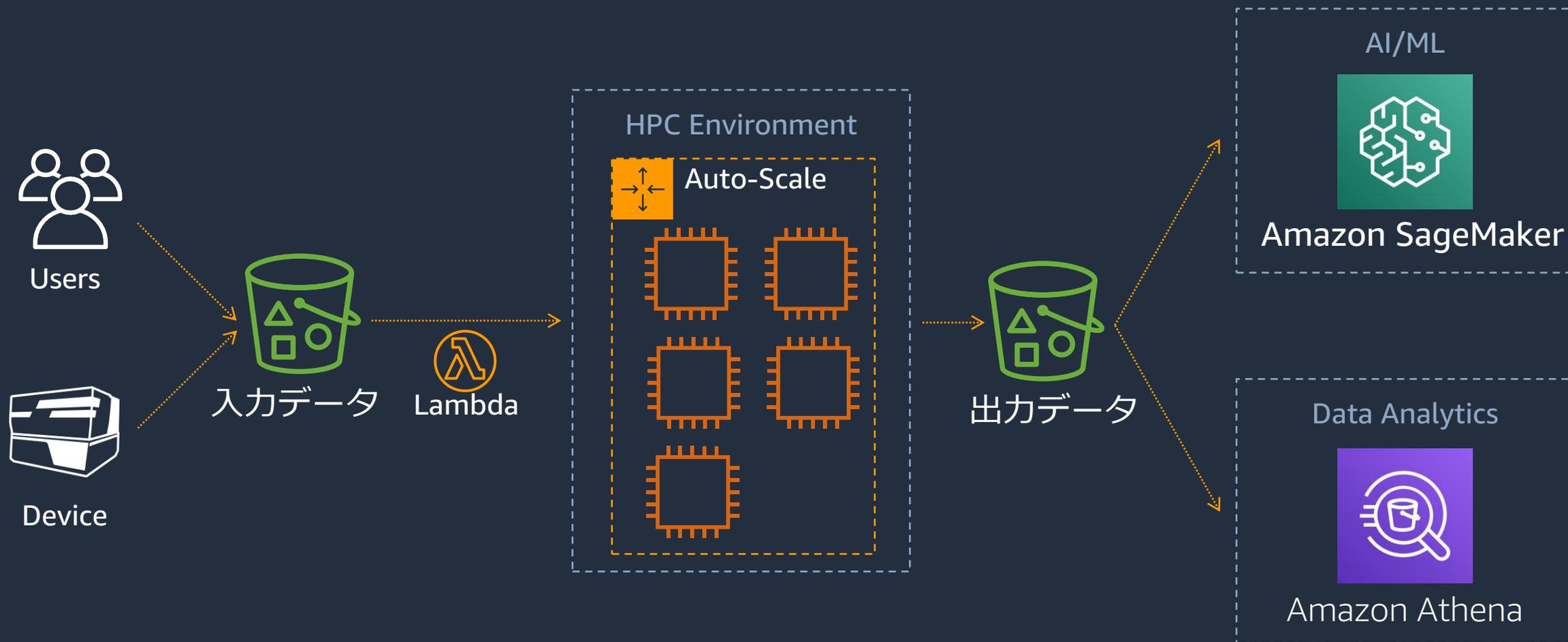
→ **Building Block の活用**



データドリブンなHPC環境とデータ活用

データのアップロードをトリガーにHPC環境を展開し自動で処理を行う

更にS3のデータレイク化により大規模シミュレーション結果を機械学習環境で活用



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

計算機の規模が大きくなればなるほど
大変に、、、

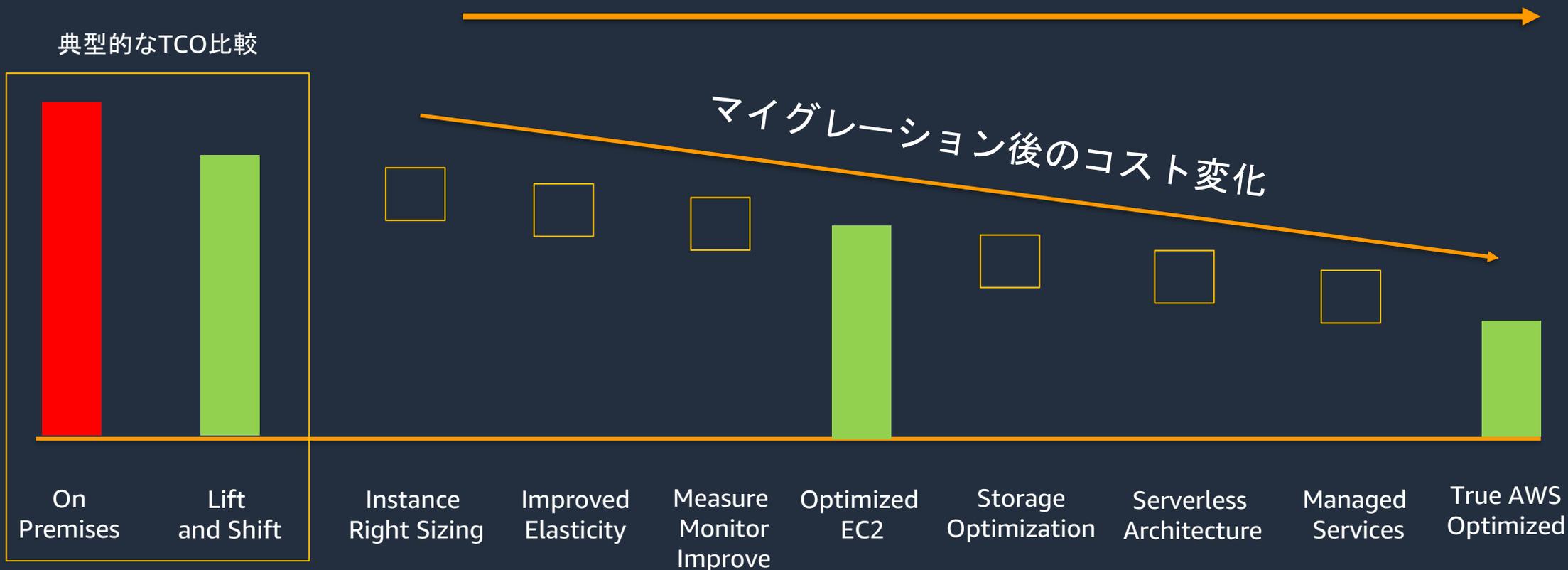


競争優位につながらない物理的管理はクラウドにお任せ
他社と差別化可能な部分に集中

継続的な改善によるコスト最適化

クラウド活用では、最初から最適を目指すよりも
小さな改善のサイクルを継続的に実施していくことが重要

マイグレーション後の構成の見直しや
新しいサービスの活用



AWS の クラウド HPC 関連サービス

AWS における HPC 関連サービス

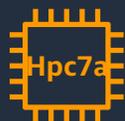
多様な HPC ワークロードに対応するための数多くのサービス

コンピューート

Amazon EC2



用途に応じて多様なインスタンスを利用可能な仮想サーバサービス



AMD EPYC
(Genoa)



AWS Graviton3



アクセラレータとして
NVIDIA H100 GPU 搭載

スポットインスタンスの活用で大幅なコスト減も可能

ストレージ

Amazon S3



高い耐久性と低コストでのデータ保管を実現するオブジェクトストレージ

Amazon FSx for Lustre



S3連携可能な高速な分散ファイルシステムをフルマネージドで提供

AWS Snow ファミリー



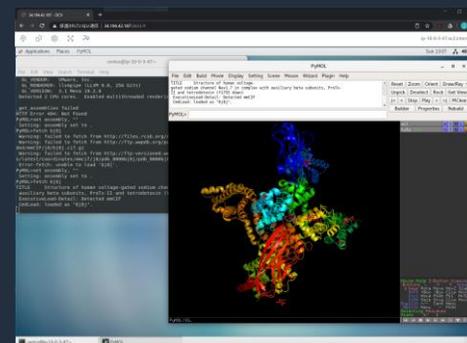
ストレージ内蔵の筐体を郵送することで S3 にデータを Import/Export

可視化

NICE-DCV



GPUアクセラレーションに対応し、インタラクティブなアプリケーションに適したデスクトップ仮想化



管理自動化

AWS ParallelCluster

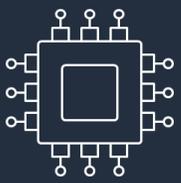


AWS上に HPC クラスタを自動で構築。Slurm ジョブスケジューラに対応しており既存 HPC 環境からの移行が容易

AWS Batch



コンテナベースの大規模バッチジョブコンピューティング環境をフルマネージドで提供



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

C6i 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 Rapids

最大全コア 3.9 GHz 駆動

C6a インスタンス

EPYC Milan

最大 3.3 GHz 駆動

Hpc6a インスタンス

EPYC Milan

HPC特化

C7g インスタンス

64bit Arm Neoverse V1ベース
AWS Graviton3 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

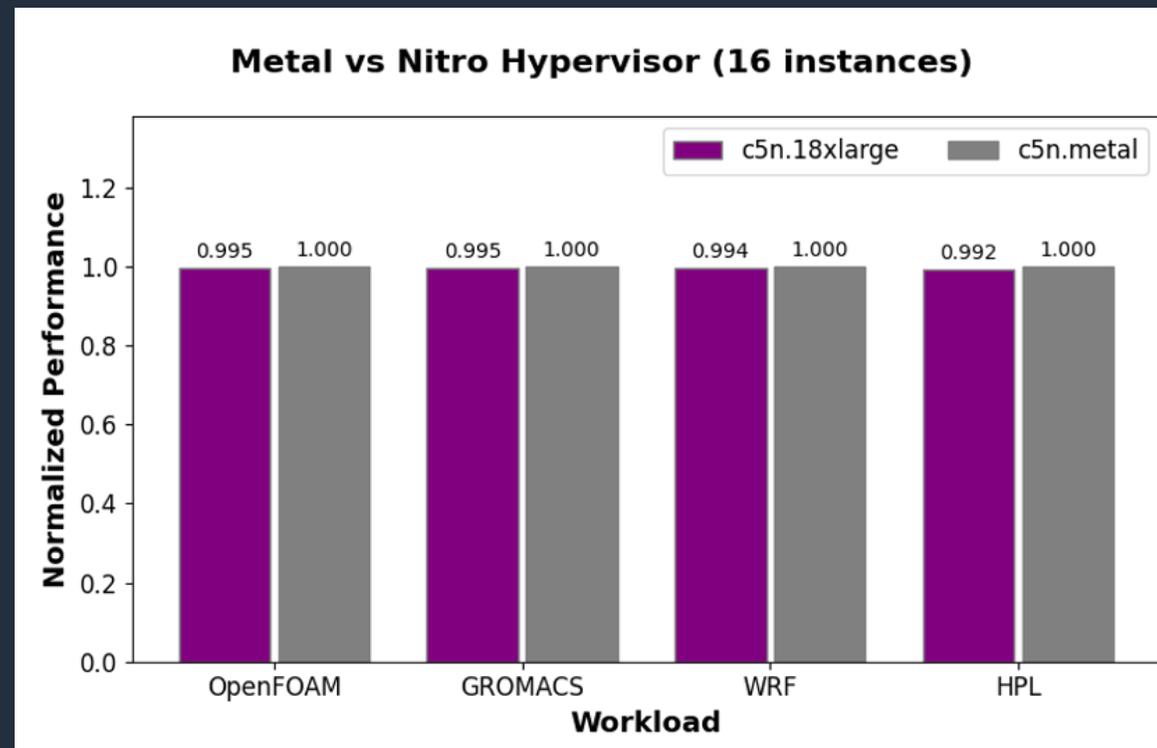
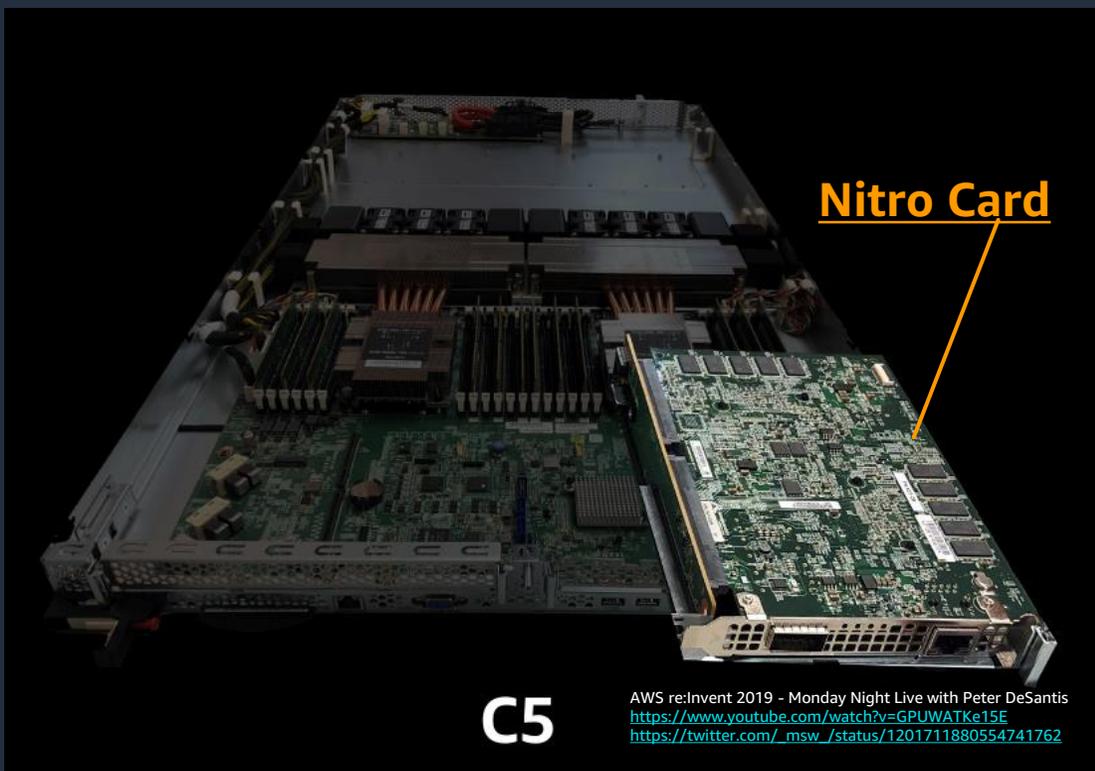


Amazon EC2 の仮想化基盤である AWS Nitro System

2017年に EC2 の新しい仮想化基盤である Nitro System を発表

仮想化のために必要な処理を、**外部の専用ハードウェアにオフロード**

仮想化オーバーヘッドによるパフォーマンス影響を極小化、セキュリティの向上



<https://aws.amazon.com/blogs/hpc/bare-metal-performance-with-the-aws-nitro-system/>



EFA: Elastic Fabric Adapter

MPI/NCCL で利用可能な低レイテンシネットワークアダプタ

c5n.18xlarge, c6gn.16xlarge, p4dn.24xlarge 等の EFA 対応インスタンスで利用可能

OpenMPI, Intel MPI, MVAPICH2 が対応

通信プロトコルとして、TCP/IP ではなく、独自の SRD (Scalable Reliable Datagram) を使用

インスタンス間通信速度

C6in

c6in.32xlarge
200 Gbps

C7gn

c7gn.16xlarge
200 Gbps

P4d

p4d.24xlarge
400 Gbps
(GPUDirect RDMA対応)

計算ノード間の通信レイテンシが重要となる処理例



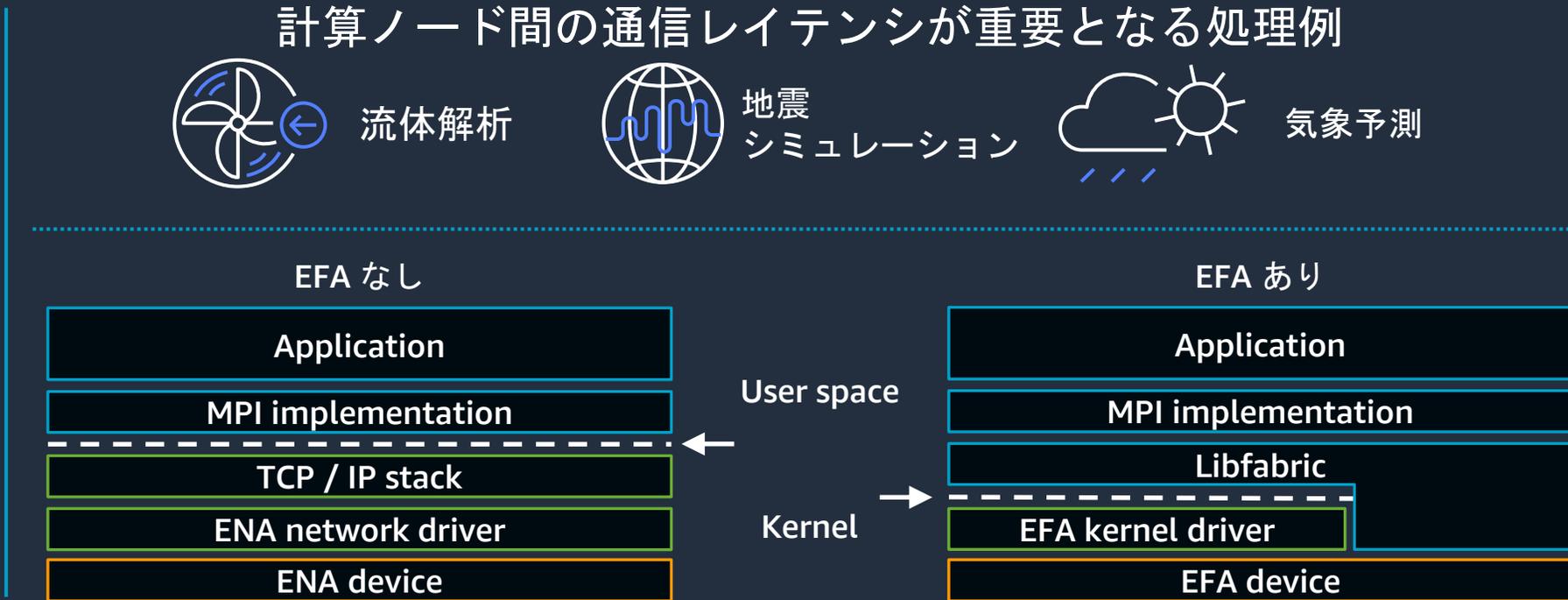
流体解析



地震シミュレーション



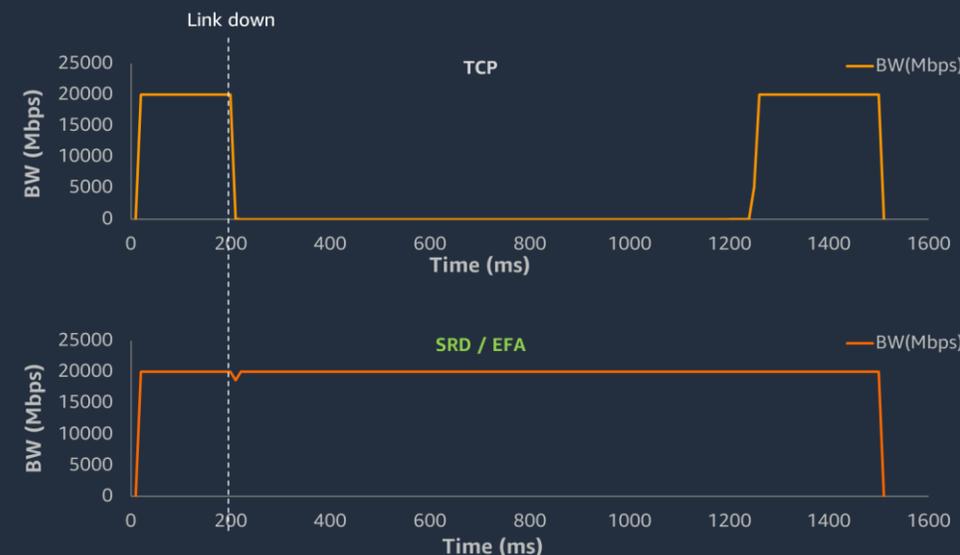
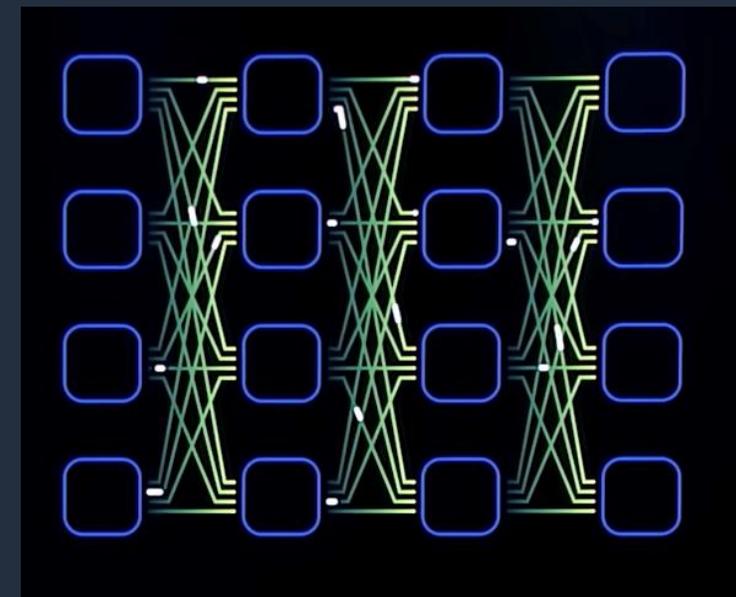
気象予測



Scalable Reliable Datagram (SRD)

AWS のデータセンターネットワーク向けに
新たに開発されたトランスポートプロトコル

- マルチパスルーティング : データセンターの複数のネットワーク経路を活用
- アウトオブオーダーでの転送 : ブロックを抑制
- レイテンシ・ジッターの低減 : 独自の link/switch ダウン検出、輻輳制御
- 配信保証 : EC2のリソースを使用せずに保証を行う



L. Shalev, H. Ayoub, N. Bshara and E. Sabbag, "Supercomputing on Nitro in AWS Cloud,"
in IEEE Micro, doi: 10.1109/MM.2020.3016891.
<https://ieeexplore.ieee.org/document/9167399>

2023年に登場した新しいインスタンスタイプ

- **M7i インスタンス**
第 4 世代 Intel Xeon スケーラブルプロセッサ (Sapphire Rapids) 搭載
Intel Advanced Matrix Extension (AMX) をサポート
- **M7a インスタンス**
第 4 世代 AMD EPYC プロセッサ (Genoa) 搭載
- **C7g/M7g/R7g インスタンス**
AWS Graviton3 プロセッサ搭載
(東京リージョンでも利用可能)

第 7 世代インスタンスは全て DDR5 メモリを搭載しており
メモリバンド幅が向上

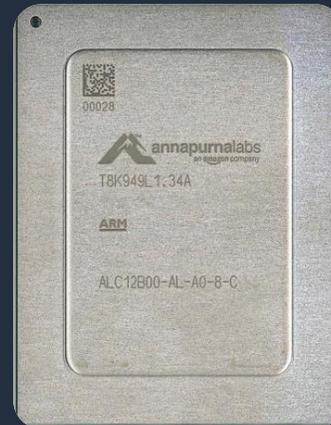
AWS Graviton

AWS は独自ハードウェア開発に継続的な投資を行っており
新たなプロセッサを発表し続けている

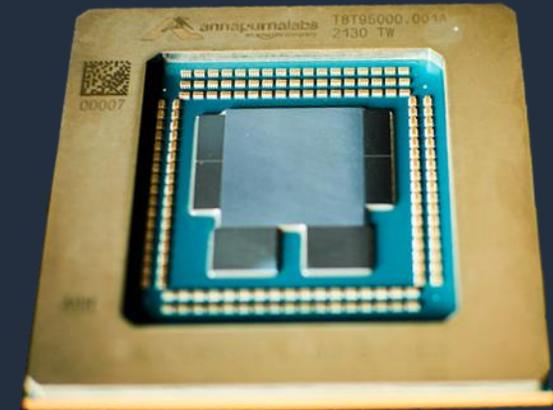
Graviton
2018



Graviton2
2019



Graviton3
2021



AWS Graviton を活用いただいているカスタマー



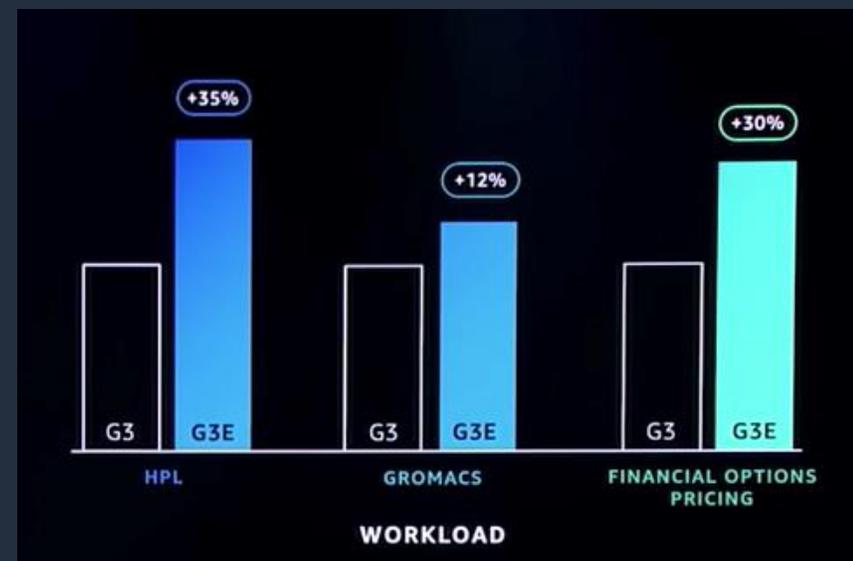
AWS Graviton3E

HPC向けに最適化されたGraviton3の派生型プロセッサ

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
- ・ 金融におけるオプション価格決定 : 30%性能向上



HPC 系インスタンスタイプ一覽

HPC に特化し、高いコストパフォーマンス・ネットワーク帯域を提供

- **Hpc6a**: 2022年1月提供開始
 - AMD EPYC 第3世代 (Milan) 搭載、ネットワーク帯域 100 Gbps
- **Hpc6id**: 2022年11月提供開始
 - Intel Xeon 第3世代 (Icelake) 搭載、ネットワーク帯域 200 Gbps
- **Hpc7g**: 2023年6月提供開始 **New!**
 - AWS Graviton3E 搭載、ネットワーク帯域 200 Gbps
- **Hpc7a**: 2023年8月提供開始 **New!**
 - AMD EPYC 第4世代 (Genoa) 搭載、ネットワーク帯域 300 Gbps

HPC7g ローンチエンドースメント

エコシステムの拡大に注力し、 日本のお客様や ISV からも Graviton 対応を進めていただいている



"RIKEN and AWS collaborate in joint research for the establishment of a software environment on AWS where we can transparently and efficiently develop and execute applications created on the Fugaku platform, as part of our activities to digital transformation of the science platform into 'Virtual Fugaku.' We have already confirmed that multiple Fugaku applications provide excellent performance on the AWS Graviton3E processor in the AWS Cloud environment. We are confident that Amazon EC2 Hpc7g instances must be the key service that will greatly accelerate our collaboration. Furthermore, we expect Hpc7g to be an important foundation for expanding the Arm ecosystem pioneered by Fugaku into the HPC world."

Prof. Satoshi Matsuoka, Director, RIKEN Center for Computational Science (R-CCS)



"Metro Weather's mission is to visualize wind conditions to ensure that people can make the right decisions for safe and effective operations for a variety of systems throughout the world. To serve that mission, it uses Doppler Light Detection and Ranging (LIDAR) and high performance computing (HPC) to measure live wind conditions and has developed a 3-dimensional (3D) wind monitoring system and a wind forecasting program. We are excited to have tested wind forecasting workloads on Amazon EC2 Hpc7g instances based on AWS Graviton3E processors and achieved up to 30% performance improvement over previous generation AWS Graviton2-based instances. Based on the impressive performance of Hpc7g instances it is clear that Arm CPU architectures have become a realistic choice for HPC. We expect AWS Graviton-based instances to contribute greatly to Metro Weather's business."

Jun-ichi Furumoto, CEO, Metro Weather Co. Ltd.



"Jij is a startup focused on addressing combinatorial optimization challenges using quantum technologies. We have conducted a benchmark analysis to solve an optimization problem that typically demands a significant amount of computational calculation time. Our results showed Amazon EC2 Hpc7g instances, powered by AWS Graviton3E processors, performed 1.6x better in speed compared to previous generation AWS Graviton2 based instances without changing any implementation. We are confident that this Arm-based device architecture will enhance the performance of solutions in industries such as logistics and telecommunications."

Kohji Nishimura, CTO, Jij



"Ansys is excited to support the LS-DYNA solver on the new Amazon EC2 Hpc7g instances, powered by Arm-based AWS Graviton processors. Mutual customers can expect a significant boost in compute performance at a lower cost while also saving energy, helping make progress toward achieving sustainability goals. Our internal benchmarks showed an average of more than 30% boost in performance over the previous generation due to increased vector operations and faster bandwidth across compute nodes."

Siddharth Shah, Principal Product Manager, Ansys



"Siemens and AWS have collaborated closely to enhance the scalability of Simcenter STAR-CCM+, enabling it to seamlessly run on a wide range of CPU and GPU instances. Our unwavering dedication to empowering simulation engineers with cutting-edge HPC technology is reflected in the launch of Simcenter Cloud HPC, which seamlessly connects Simcenter STAR-CCM+ to HPC on the cloud. We recognize the importance of reducing carbon footprint, and we're proud to offer our customers the latest generation of Amazon EC2 instances powered by Arm-based AWS Graviton processors. These, combined with the exceptional parallel efficiency of Simcenter STAR-CCM+, help minimize energy consumption while delivering high-performance engineering simulations."

Jean-Claude Ercolanelli, Senior Vice President, Simulation and Test Solutions, Siemens



<https://aws.amazon.com/ec2/instance-types/hpc7g/>

International Workshop on Arm-based HPC: Practice and Experience (IWAHPCE-2024)

HPC Asia 2024 (2024年1月25-27日) 併催

International Workshop on Arm-based HPC: Practice & Experience

An HPCAsia 2024 Workshop

 [View On GitHub](#)

This project is maintained by [arm-hpc-user-group](#)

International Workshop on Arm-based HPC: Practice and Experience (IWAHPCE-2024)

to be held in conjunction with The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region ([HPC Asia 2024](#)), Japan, Jan 25 - 27, 2024

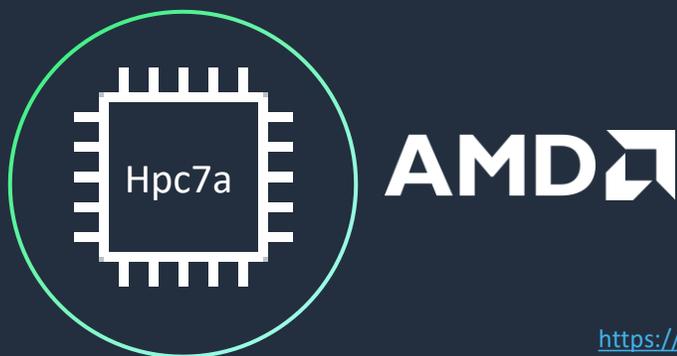
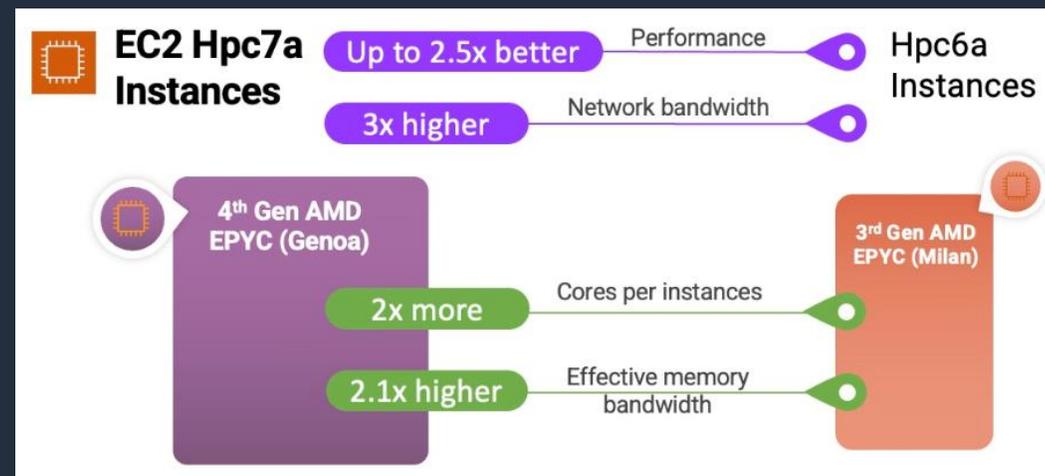
Workshop Overview

This workshop aims to provide the opportunity to share the practice and experience of high-performance computing systems using the Arm architecture and their performance and applications. The last few years have seen an explosion of 64-bit Arm-based processors targeted toward server and infrastructure workloads, often specializing in a specific domain such as HPC, cloud, and machine learning. Fujitsu's A64FX and Marvell's ThunderX2 have been used in several large-scale HPC systems, and Amazon's Graviton2 has been adopted by Amazon EC2. Moreover, Amazon's Graviton3, NVIDIA Grace CPU Superchip, and SiPearl's Rhea system-on-chip are recently announced or become accessible. Sharing the practice and experiences using these Arm-based processors will contribute to advancing high-performance computing technology for newly designed systems using these new emerging Arm-based processors.

Amazon EC2 Hpc7a インスタンス

AVAILABLE

- AMD 第4世代 EPYC Genoaプロセッサを最大192コア、および768GBのDDR5メモリを搭載。300GbpsのEFAネットワークに対応
- 前世代のHPC6a インスタンスと比較して、コアとメモリの搭載量を最大2倍、有効メモリバンド幅が2.1倍
- 気象予測、流体解析等のワークロードに最適
- 1物理コアあたり \$0.0375/ 時間*
- Ohio, Ireland, GovCloud リージョンにて2023年8月より一般提供開始



Instance	vCPU (物理コア)	memory	EFA Network BW	On-Demand Hourly rate
hpc7a.12xlarge	24	768GB	Up to 300Gbps	\$7.20
hpc7a.24xlarge	48			
Hpc7a.48xlarge	96			
hpc7a.96xlarge	192			

<https://aws.amazon.com/blogs/aws/new-amazon-ec2-hpc7a-instances-powered-by-4th-gen-amd-epyc-processors-optimized-for-high-performance-computing/>



Amazon EC2 P5 インスタンス

8 枚の **NVIDIA H100 Tensor Core GPU** を搭載

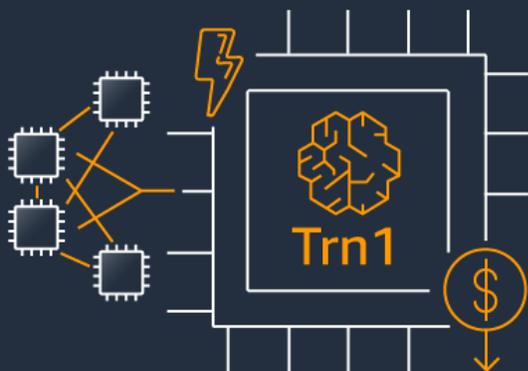
- **第二世代 EFA** を採用し、NVIDIA GPUDirect RDMA に対応した低レイテンシな 3,200 Gbps ネットワークを提供
- 最大で 20,000 GPU を接続したクラスタ構成が可能
- 北バージニア・オハイオリージョンで利用可能

<https://nvidianews.nvidia.com/news/aws-and-nvidia-collaborate-on-next-generation-infrastructure-for-training-large-machine-learning-models-and-building-generative-ai-applications>

<https://press.aboutamazon.com/2023/3/aws-and-nvidia-collaborate-on-next-generation-infrastructure-for-training-large-machine-learning-models-and-building-generative-ai-applications>

Amazon EC2 Trn1/Trn1n インスタンス

AWS 独自設計高性能 ML トレーニングチップ AWS Trainium を搭載したインスタンス



- 最大16個の **AWS Trainium** を搭載
- 同等の GPU インスタンスと比較し **最大50%低価格**を実現
- **512GB の高速 HBM2 メモリ**搭載
- **最大 1600 Gbps** の EFA ネットワーク帯域に対応
- Trn1上で学習したモデルのデプロイ先は自由
- 3万以上の1 Trainium を EC2 UltraCluster にデプロイ、6 エクサフロップスの演算性能を提供

インスタンスサイズ	Trainium	アクセラレータ メモリ	vCPU	メモリ	NeuronLink	ネットワーク帯域	オンデマンド価格 (USD/時間)
Trn1.2xlarge	1	32 GB	8	32 GB	N/A	最大 10 Gbps	1.34
Trn1.32xlarge	16	512 GB	128	512 GB	Yes	800 Gbps	21.5
Trn1n.32xlarge	16	512 GB	128	512 GB	Yes	1600 Gbps	24.78

NEW

<https://aws.amazon.com/jp/ec2/instance-types/trn1/>

*2023年4月時点の米国東部 (バージニア北部)の価格



Amazon EC2 Inf2 インスタンス

最もコスト効率の高い 生成系 AI モデルに対応した推論向けインスタンス **NEW**



- 第2世代 ML推論チップ **AWS Inferentia2** 搭載
- Inf1 と比較して**最大4倍**高いスループット、**10分の1**の低レイテンシーを実現
- 384 GB の高速 HBM2 メモリ搭載
- 大規模 生成系 AI モデルに対応
- 175B パラメータモデルを単一サーバ上にデプロイ可能

インスタンスサイズ	Inferentia2	アクセラレータメモリ	vCPU	メモリ	NeuronLink	ネットワーク帯域	オンデマンド価格 (USD/時間)
Inf2.xlarge	1	32 GB	4	16 GB	N/A	最大 15 Gbps	0.76
Inf2.8xlarge	1	32 GB	32	128 GB	N/A	最大 25 Gbps	1.97
Inf2.24xlarge	6	192 GB	96	384 GB	Yes	50 Gbps	6.49
Inf2.48xlarge	12	384 GB	192	768 GB	Yes	100 Gbps	12.98

<https://aws.amazon.com/jp/ec2/instance-types/inf2/>

*2023年4月時点の米国東部 (バージニア北部)の価格



AWS では目的に応じて様々なアクセラレータの選択肢を提供



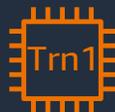
機械学習
(トレーニング)



NVIDIA H100
Tensor Core GPU



NVIDIA A100
Tensor Core GPU



AWS Trainium



Habana Labs
Gaudi アクセラレーター

機械学習
(推論)



NVIDIA A10G
Tensor Core GPU



AWS Inferentia2



NVIDIA T4 GPU



AWS Inferentia

グラフィックス



NVIDIA A10G
Tensor Core GPU



NVIDIA T4 GPU



AMD Radeon Pro
V520 GPU



AWS Summit Tokyo 2023 での実物展示



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



※2022年6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...

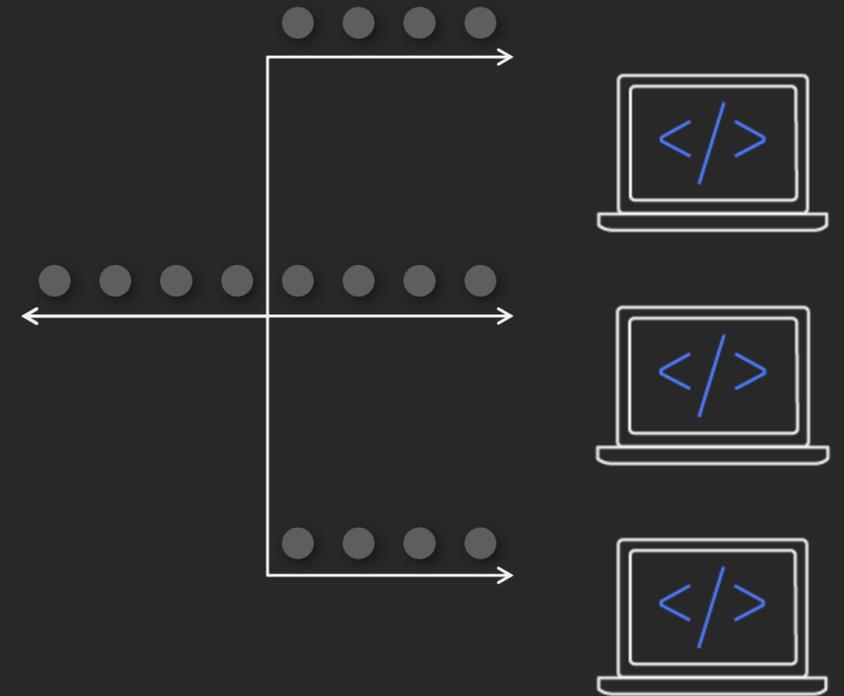


Data stored in Amazon S3 is loaded to Amazon FSx for processing



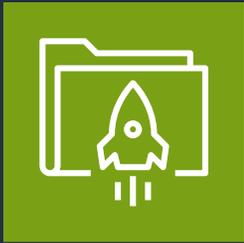
FSx

Output of processing returned to Amazon S3 for retention

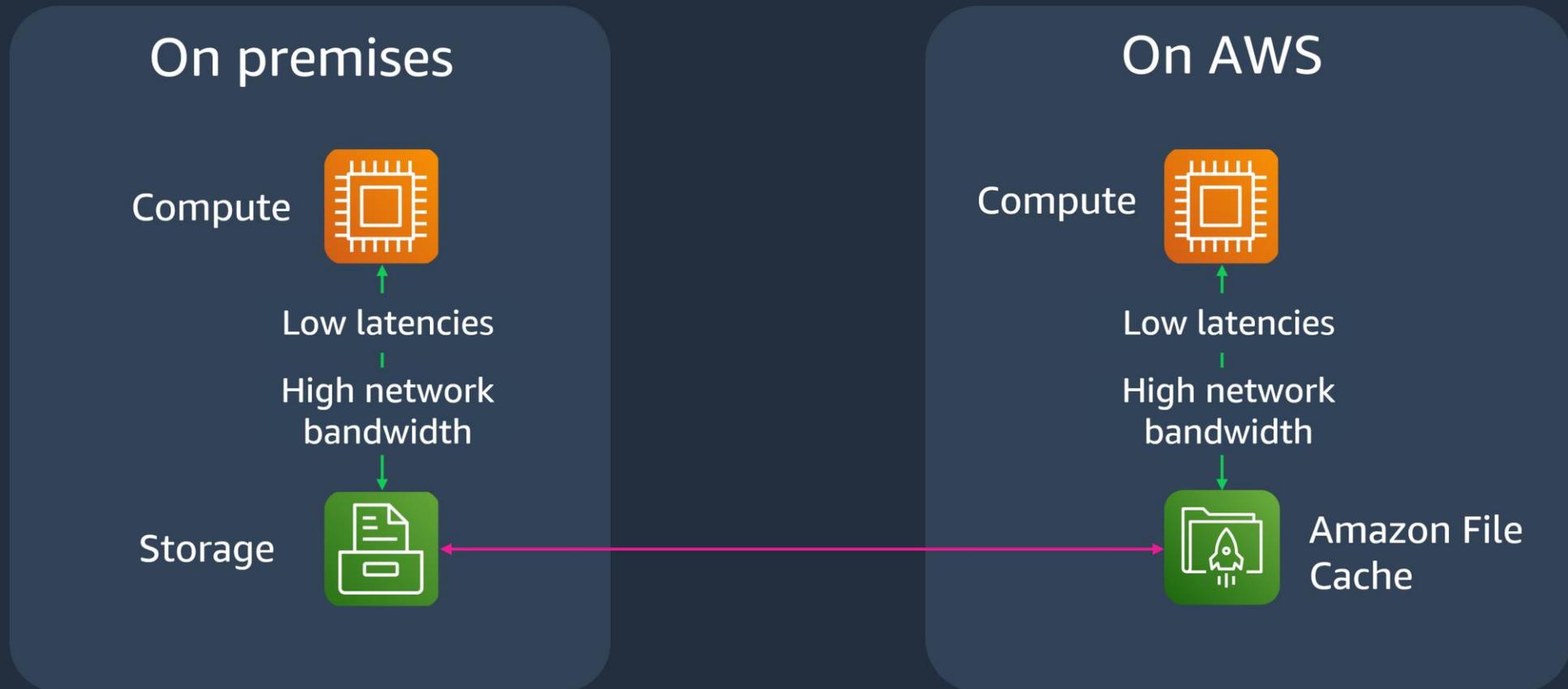


Amazon File Cache

オンプレミスの NFS ストレージをクラウド側でキャッシュ



Amazon File Cache



AWS Snow Family

ハードウェアアプライアンスを郵送することでオンプレミス〜クラウド間のデータ移行を高速化

データの自動暗号化や不正開封防止筐体によるセキュリティ確保
一度に大量のデータを送ることができるが、郵送に時間や手間がかかる点には注意が必要

AWS Snowball Edge

Storage Optimized の場合、
約 22 kg の筐体に 100 TB の HDD を搭載

AWS Snowcone

約 2 kg と軽量な筐体に 8TB or 12TB のストレージを搭載

AWS DataSync エージェントを実行でき
オンライン転送用環境としても利用可能

※ AWS Snowball Edge/AWS Snowcone 共に東京リージョンで利用可能



AWS Snowball Edge



AWS Snowcone
aws

NICE DCV



機能と特徴

- 高性能なNICE DCVプロトコルにより、クラウド上のデスクトップ画面を高速にストリーミング、スムーズな画面描画による快適なVDI環境を実現
- Windows、Linuxの両方に対応
- GPU搭載インスタンスと組合せて使用することで、サーバー側に搭載されたGPUによる高度な3Dグラフィックス描画の他、H.264ハードウェアエンコードによりCPU負荷無く画面のストリーミングを実現 (non-GPU環境ではCPU処理で動作)
- HTML5クライアントサポートにより、専用クライアントアプリの他、ブラウザでのリモートアクセスにも対応
- Amazon EC2で利用する場合は追加のライセンスコスト無しで利用可能



NICE-DCVプロダクトページ → <https://aws.amazon.com/hpc/dcv/>



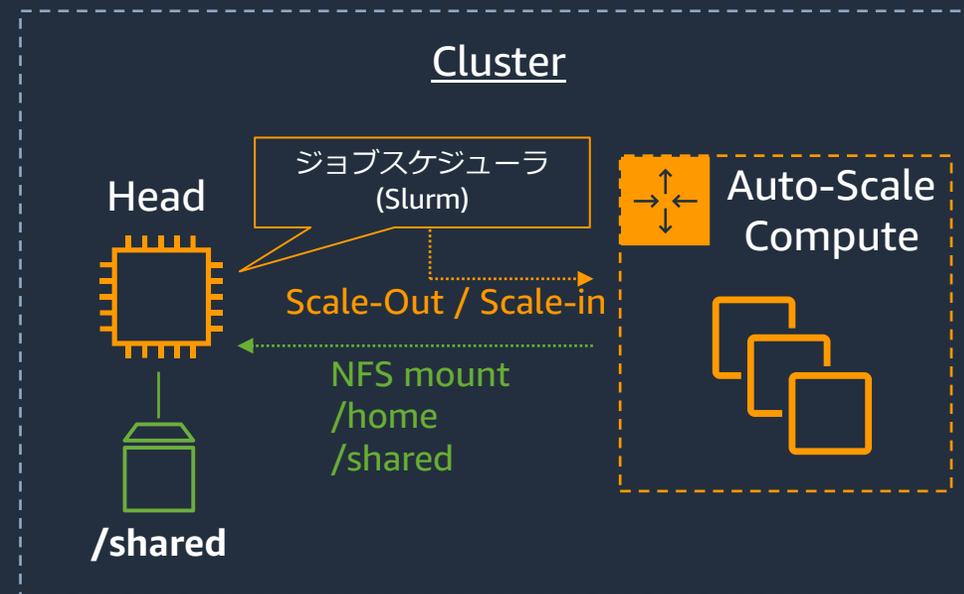
AWS ParallelCluster とは

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>



AWS ParallelCluster の利用方法

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

コマンドラインツールでクラスタを作成・管理

ウェブツールでクラスタを作成・管理

```
$ pcluster create-cluster <NAME>
```

ParallelCluster 設定ファイル例

```
HeadNode:
  InstanceType: c6g.large
Scheduling:
  Scheduler: slurm
  SlurmQueues:
    - Name: queue0
  ComputeResources:
    - Name: queue0-c6g16xlarge
      MinCount: 0
      MaxCount: 40
      InstanceType: c6g.16xlarge
```

or

The screenshot shows the AWS ParallelCluster console interface. At the top, it displays the user 'hpc-user@amazon.com' and the region 'eu-west-1'. The main heading is 'AWS ParallelCluster Clusters (3) Info'. Below this, there are buttons for 'Edit', 'File system', 'Shell', 'DCV', 'Start fleet', 'Stop fleet', 'Delete', and 'Create cluster'. A search bar labeled 'Find clusters' is present. A table lists three clusters:

Name	Status	Version
hpc-cluster-1	UPDATE COMPLETE	3.4.0
hpc-cluster-2	CREATE COMPLETE	3.4.0
hpc-cluster-3	CREATE COMPLETE	3.4.0

Below the table, the details for 'Cluster: hpc-cluster' are shown. The 'Properties' section includes:

- SSH command: `ssh ec2-user@10.1.1.1.1`
- Cluster status: CREATE COMPLETE
- Compute fleet status: RUNNING
- Created time: February 02, 2023 at 10:50 (UTC-8:00)
- Latest update time: February 02, 2023 at 10:50 (UTC-8:00)
- Region: eu-west-1
- Version: 3.4.0

At the bottom right, there is an 'EC2 Instance Connect' link with the command: `mssh -r eu-west-1 ec2-user@i-abcdef01234567890`.

AWS ParallelCluster アップデート

3.1.x Launched

- Multi-user support
- Cluster access without Internet

3.2 Release (Launched)

- Support for multiple file systems
- Memory aware scheduling
- Support for new instance types
- OpenZFS, ONTAP support
- Dynamic Queue Updates
- Instance Fast Failover

3.3 Release (2022-Nov)

- Flexible instance types for capacity mgmt
- Slurm job accounting
- Dynamic Filesystem mounting
- Native ODCR support
- Slurm upgrade (22.05)
- Placement Groups per Compute resource

3.4 Release (2022-Dec)

- Support for multiple AZs
- Mount encrypted EFS filesystems via EFS Utils
- Permission boundary policy extension
- ParallelCluster lambda restricted to VPC

3.5 Release (2023-Mar)

- ParallelCluster UI
- Enabled to call Pcluster func as Python libs
- Add log of compute node out to CW

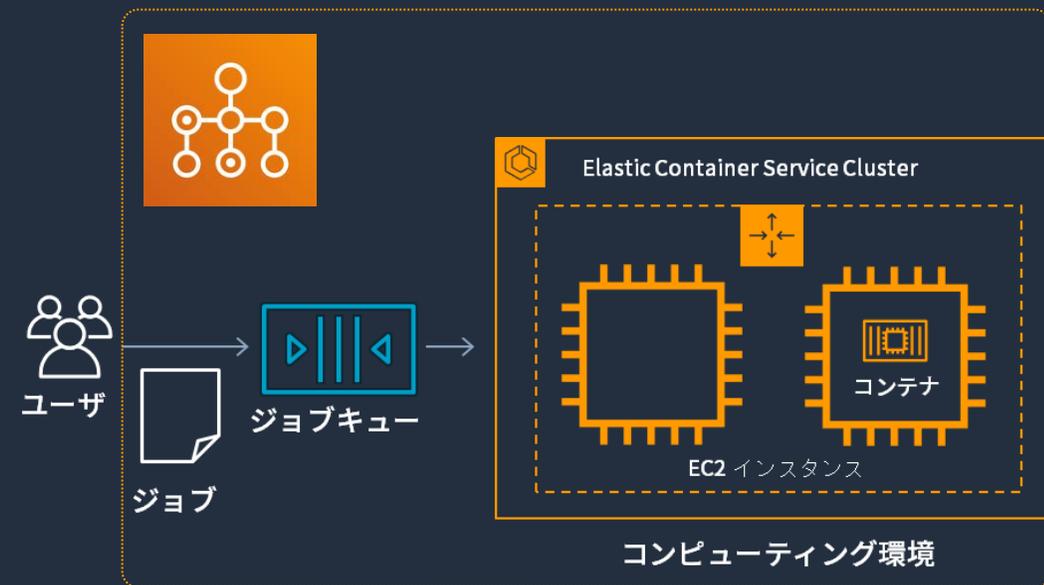
3.6 (2023-May)

- Slurm Upgrade to 23.02.2
- Custom Slurm setting
- RHEL8 support
- Number of queue 10 -> 50
- GPU healthcheck
- Multi custom bootstrap script

AWS Batch とは

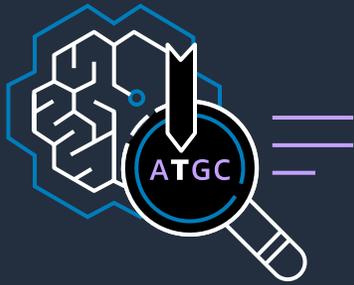
大規模バッチ処理のため環境をフルマネージドで提供

- AWS Batch がインスタンスの起動や停止を行うため、スケジューラや計算ノードなどの **管理が不要**
- ジョブは **Docker コンテナイメージ** を元に作成し、自動でスケールするコンピューティング環境で実行する
- コンピューティング環境ではインスタンスタイプや vCPU 数、スポットインスタンス利用有無などを任意に指定可能



コンテナイメージを用意するだけでスケラブルな大規模バッチ処理環境が得られる

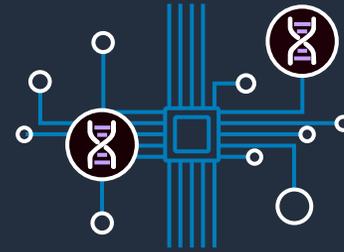
Amazon HealthOmics



**Multiomic and
multimodal
analysis**



**Population-level
scale**



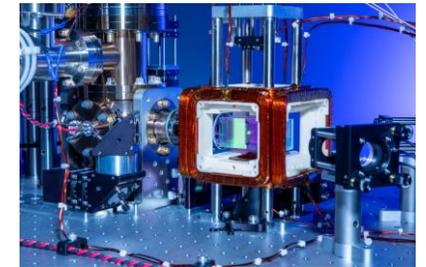
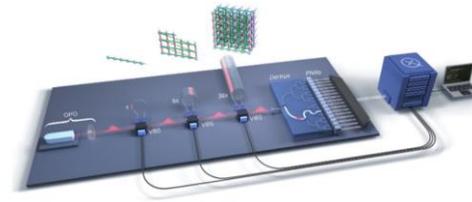
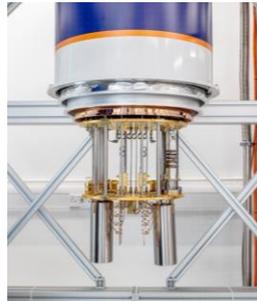
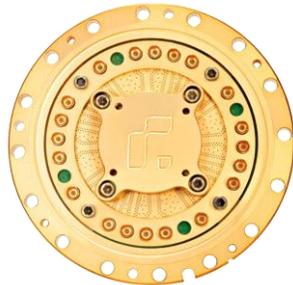
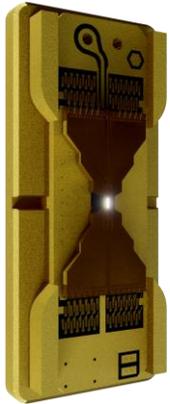
**Fully-managed
bioinformatics
computation**



**Built-in security,
privacy, and
compliance**

ヘルスケアやライフサイエンス業界において、ゲノミクス、トランスクリプトミクスなどのオミックスデータを**保存・検索・分析**し、そのデータから**インサイトの取得、健康改善、科学的発見を加速**するための専用サービス

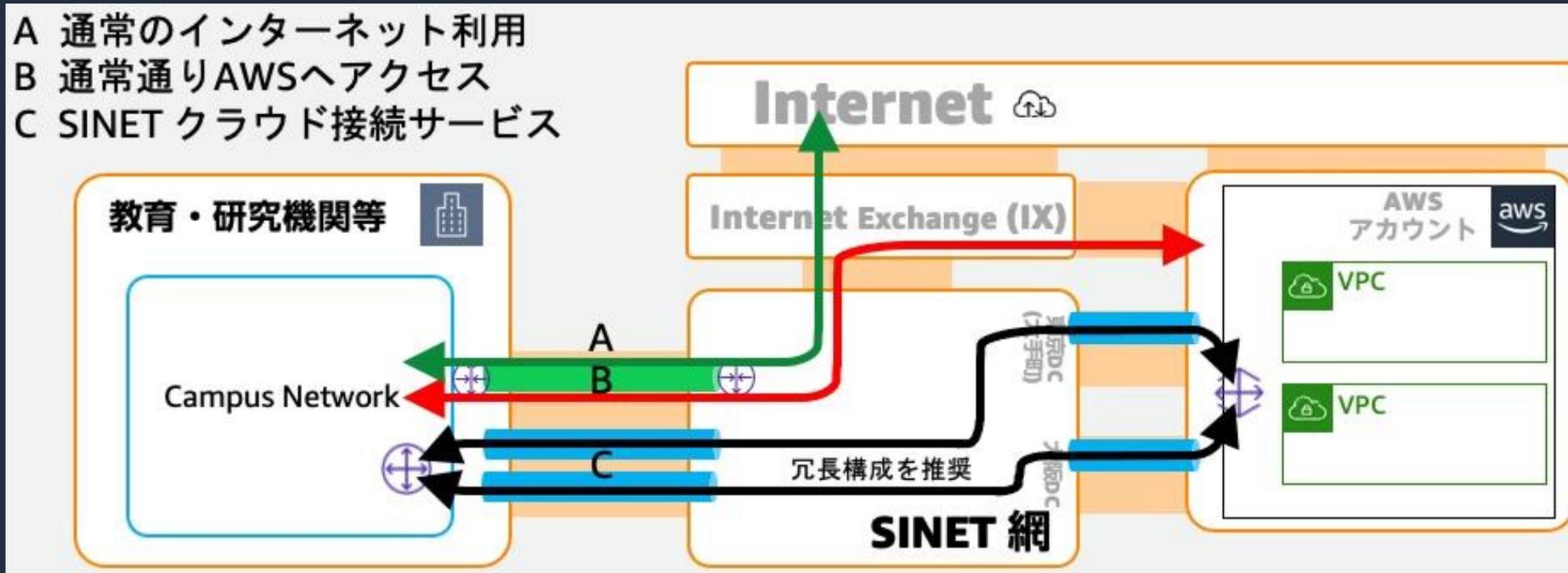
Amazon Braket AWS クラウド量子コンピューティング



- さまざまな量子ハードウェアを利用できる (QPU は随時アップデート)
- AWS のアカウントを取得すれば誰でも今すぐ量子ソフトウェア開発をスタート
- 初期費用なし、オンデマンド・従量課金のためスモールスタートできる
- AWS の各種サービスとのシームレスな連携
- Amazon Braket SDK やライブラリ Hybrid Jobs などのデベロッパーツール

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、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 (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 (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/sinet-100gbps/>

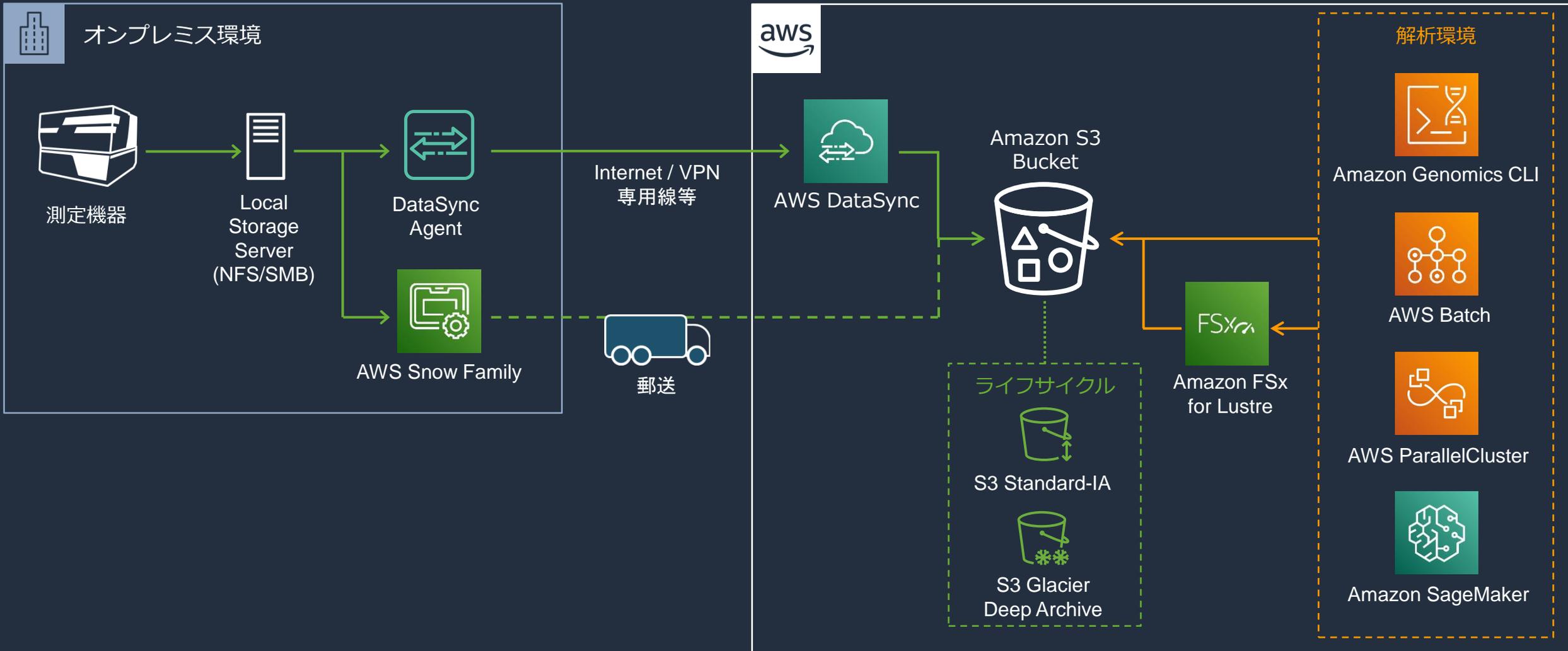
HPC on AWS アーキテクチャ

クラウド HPC アーキテクチャの考慮ポイント

- データの流れ
- ユーザーインターフェース
- コラボレーション

概念の話が中心であり、どのように実装するかについては本日は詳しくは触れない

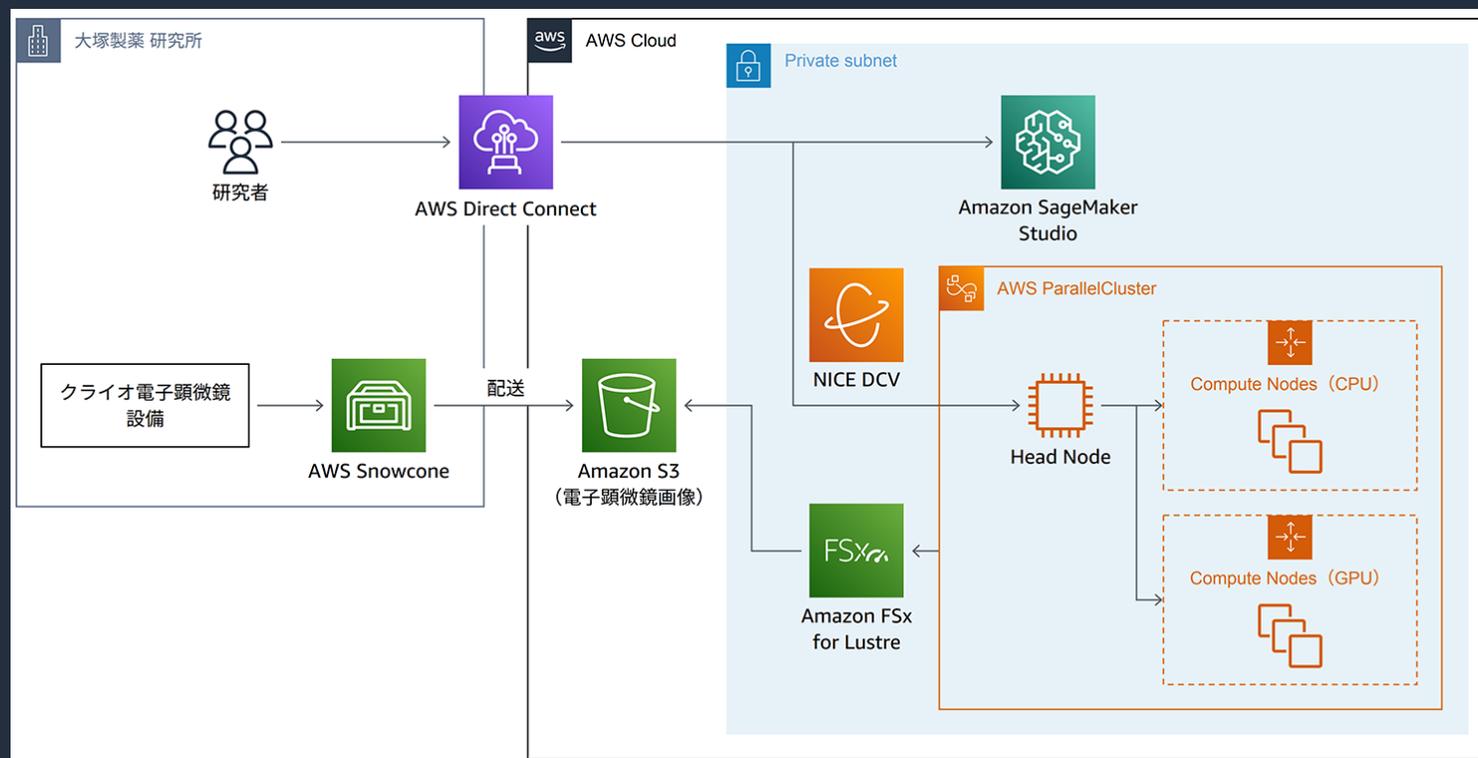
「転送・保存・解析」アーキテクチャ



大塚製薬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

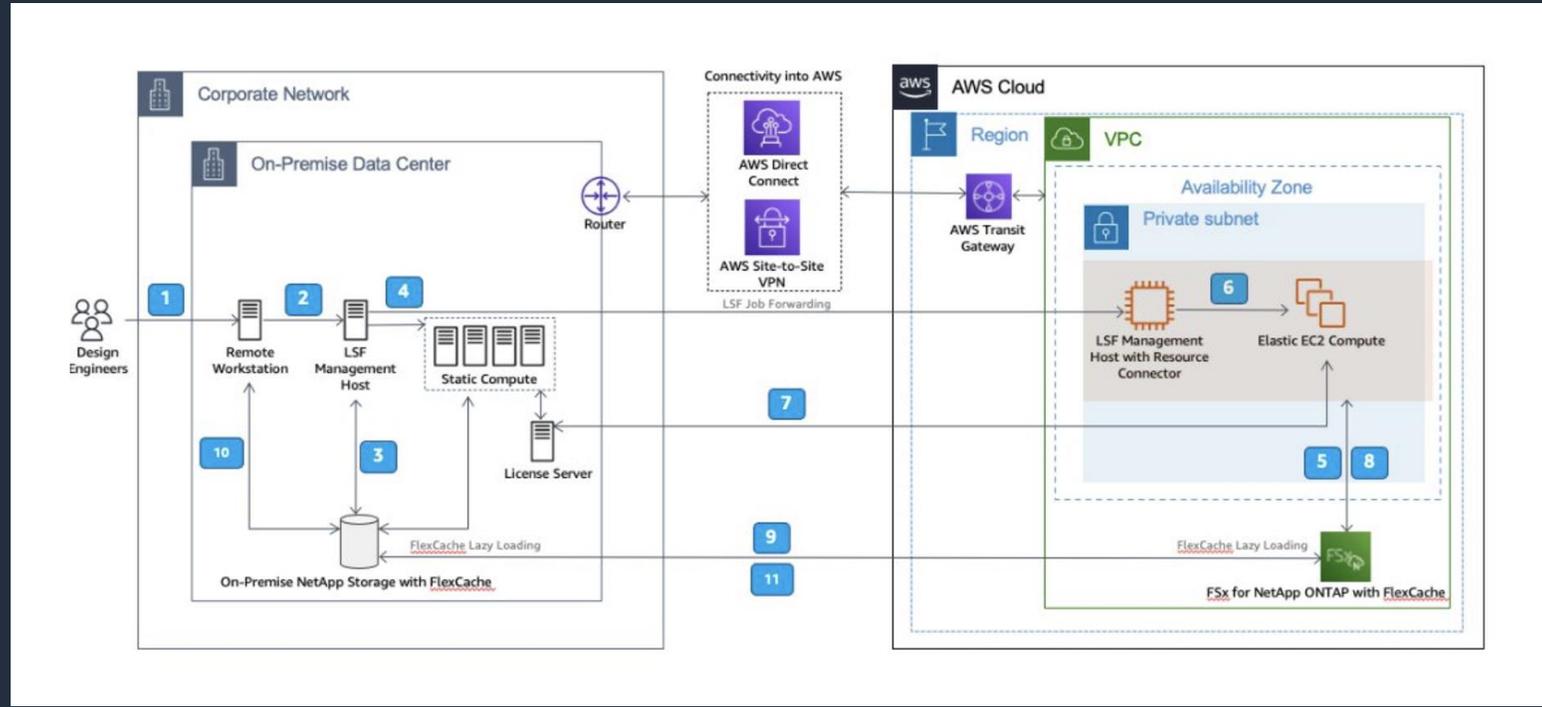


<https://aws.amazon.com/jp/solutions/case-studies/otsuka-pharmaceutical-case-study/>

HPC + ハイブリッドストレージ

オンプレミスの計算リソースが不足する際にクラウドにバースト

- 複数の商用ジョブスケジューラがクラウドバーストに対応
- Amazon FSx for NetApp ONTAP の FlexCache や Amazon File Cache を使用し、オンプレミスのデータをクラウドにキャッシュ

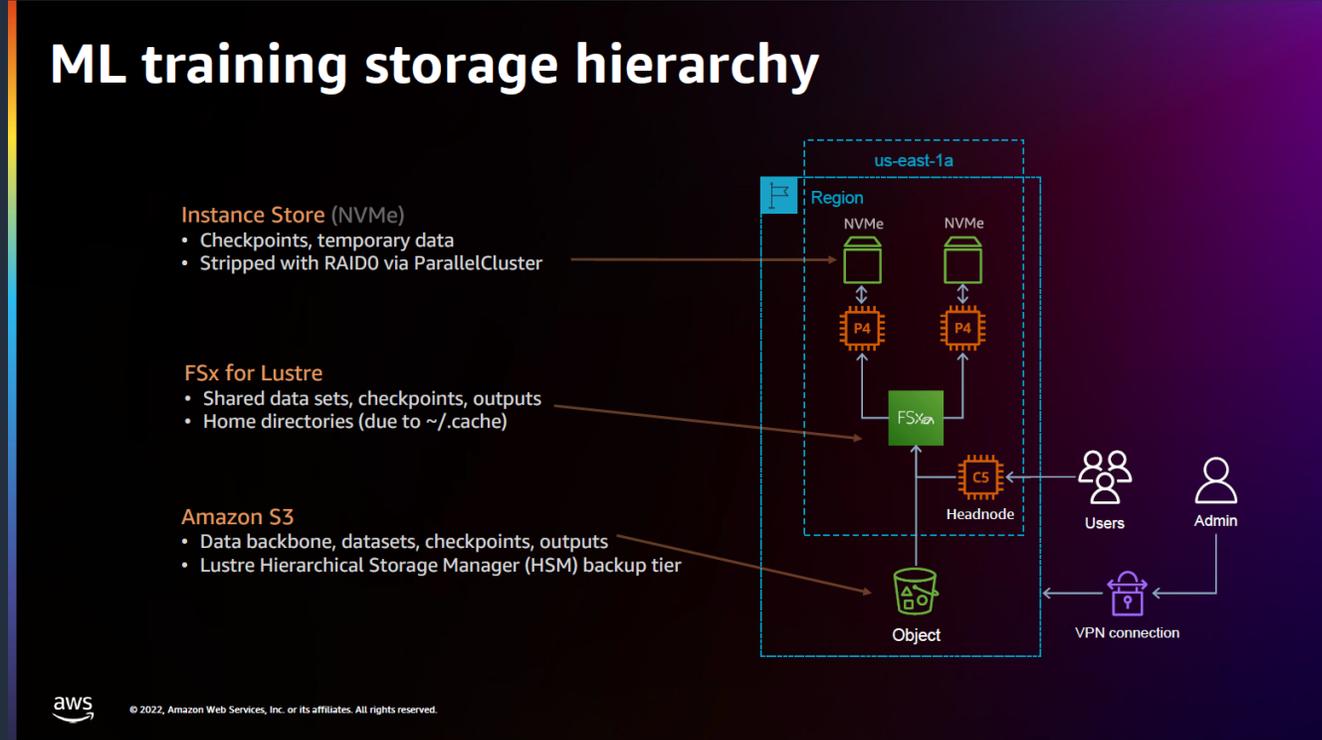


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/eda-scale-with-fsx-for-netapp-ontap-and-ibm-lsf/>



Stability AI: Stable Diffusion

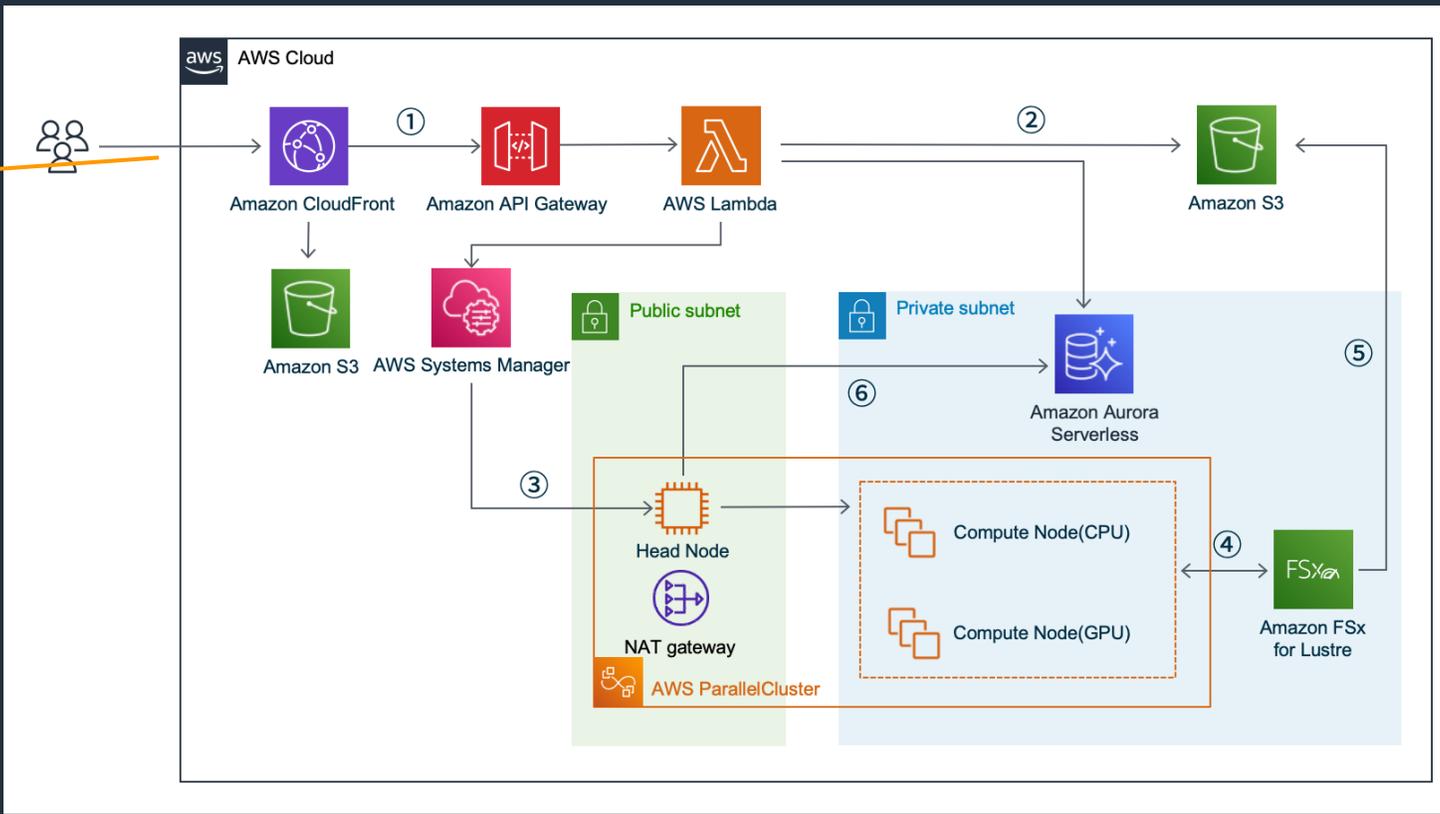
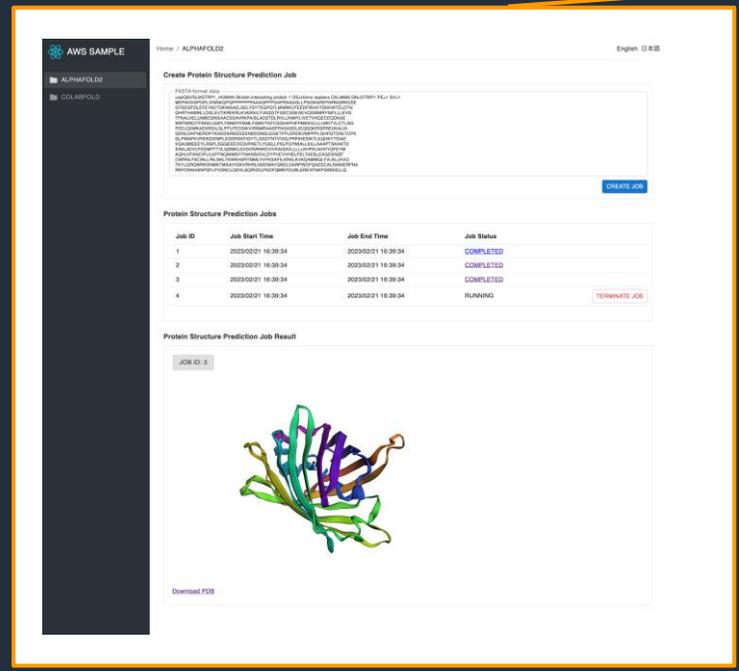
Stability AI 社では Stable Diffusion のトレーニングを行うために 4,000枚の NVIDIA A100 GPU を利用するクラスタを AWS 上に構築 (Stable Diffusion 2.0 のトレーニングには 200,000 A100・時間が必要) AWS ParallelCluster や Amazon FSx for Lustre といったサービスを活用



<https://www.youtube.com/watch?v=7I854do63Lg>

ユーザーインターフェース

ユーザーにはクラスタのアクセス権限ではなく専用のウェブフロントエンドを提供することで、利便性と管理のしやすさを両立



<https://github.com/aws-samples/alphafold-protein-structure-prediction-with-frontend-app>



第一三共株式会社様での創薬研究プラットフォーム

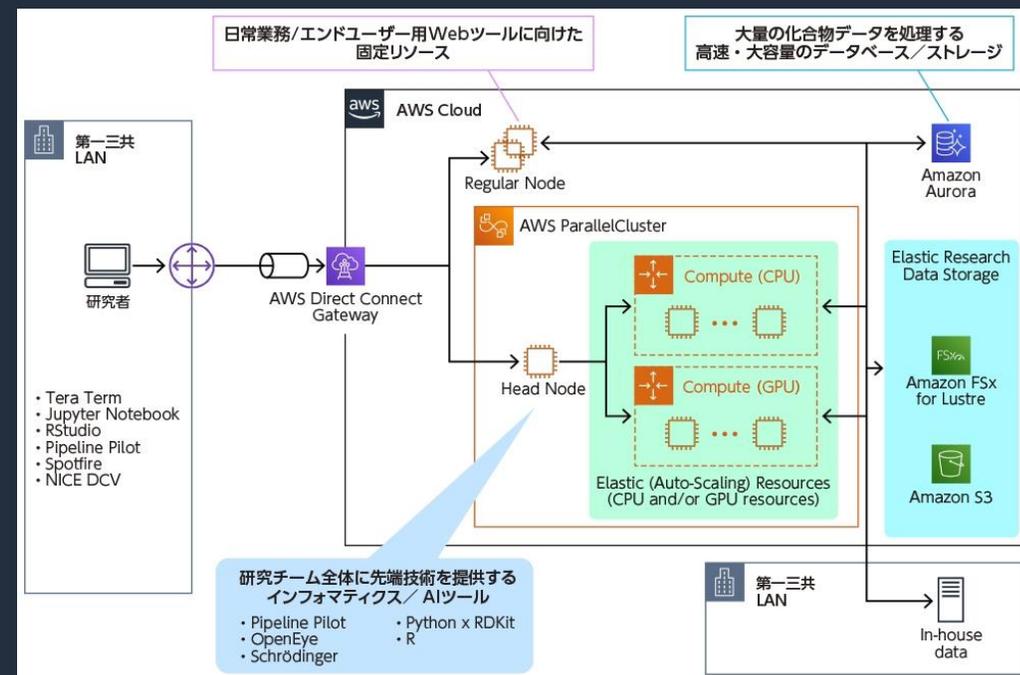
研究者のニーズを満たすプラットフォームを作る

- 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

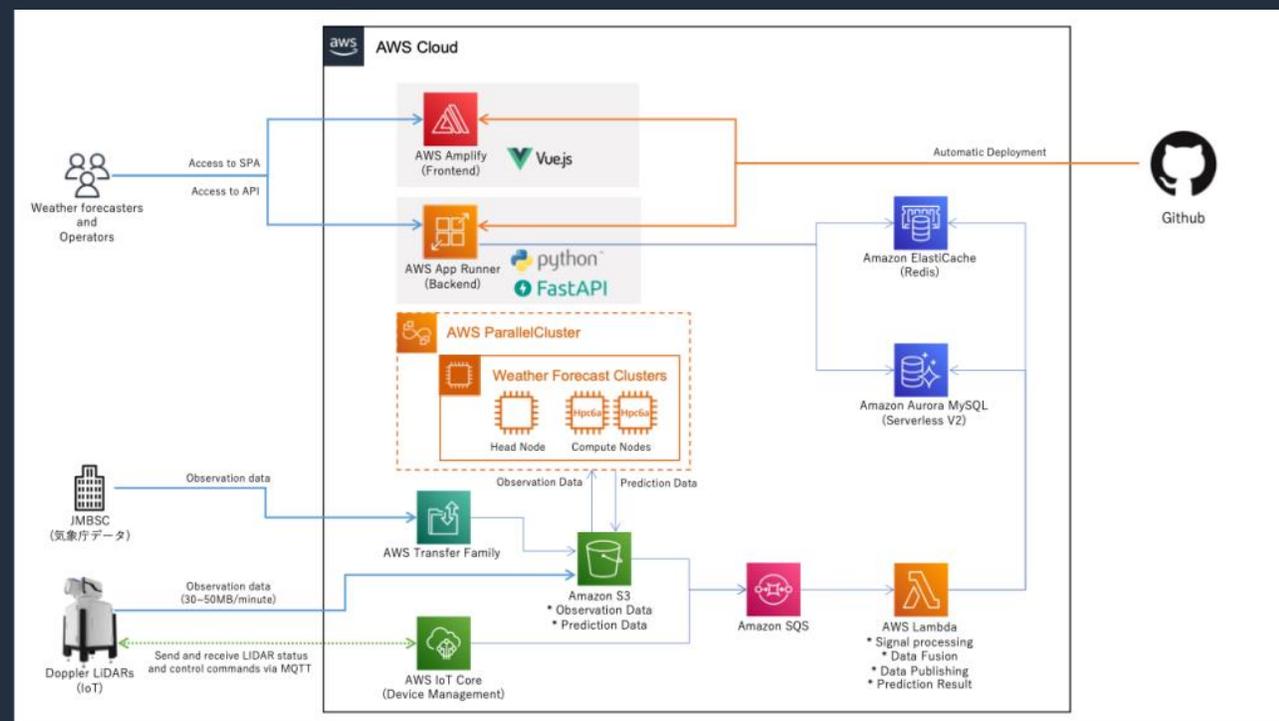


『データで新薬開発を加速！第一三共「創薬化学研究プラットフォーム」の全容』, 日経クロステック Active

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

メトロウェザー様での風況測定・予測システム

ドップラーライダーを用いたリアルタイムの風況測定・予測
IoT や HPC、ウェブフロントエンド等を組み合わせ、エンドユーザーに情報提供

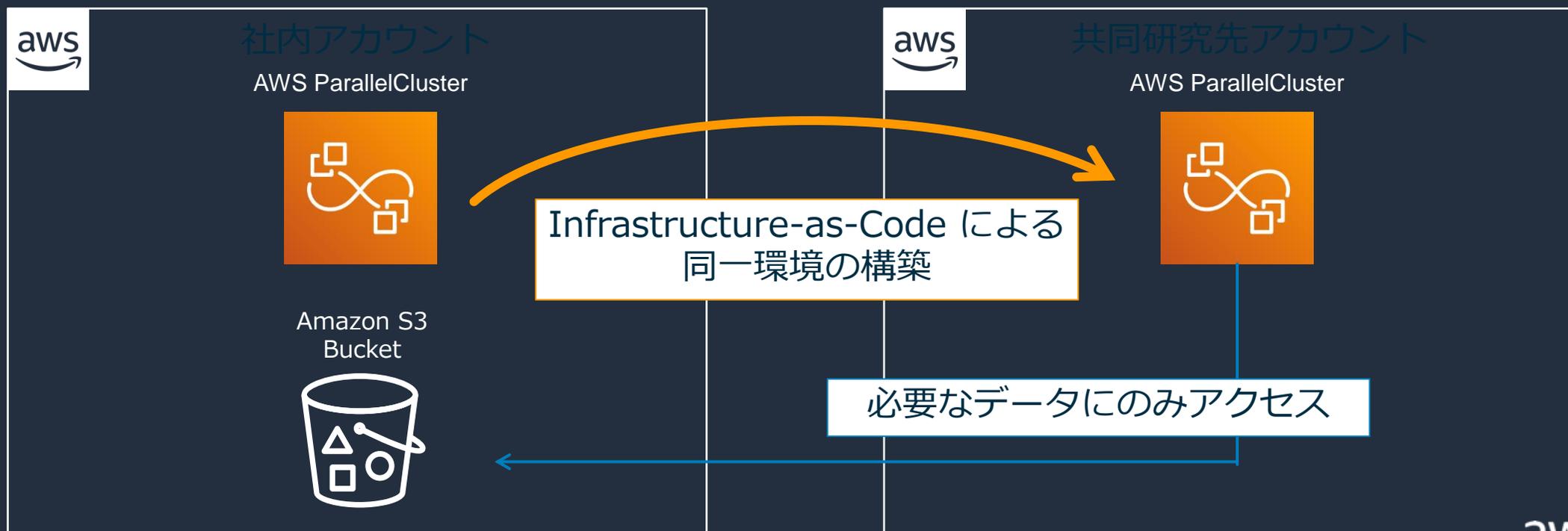


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/startup/tech-interview-metroweather-2023/>

コラボレーション

他の企業・研究機関とコラボレーションを行う際の計算環境

- ParallelCluster を用いて同じクラスタを別アカウントで構築
- 細かいアクセス権限管理により必要なデータのみアクセス



高エネルギー加速器研究機構 (KEK) 様での クライオ電顕データ解析プラットフォーム

KEK が構築した解析環境を他の研究機関や製薬企業に提供

- Infrastructure-as-code を用いることで KEK が最適化した環境をユーザーの AWS 環境内に構築可能

The screenshot shows a video call interface on the left with four participants: @boofla in London, Toshio Moriya (KEK), Yusuke Yamada (KEK), and another participant. On the right, a slide titled "KEK GoToCloud data analysis platform" illustrates the architecture. The slide shows an "AWS Cloud" environment where a "KEK" box contains "Amazon EFS" and "Amazon S3". Arrows indicate data flow from KEK's Amazon S3 to "User A" and "User B". Each user's environment includes "AWS ParallelCluster" and "Amazon S3". The KEK environment also contains "Data analysis software", "Scripts", and "Configuration". A logo for "WHAT IS LIFE?" is visible in the top right corner of the slide. Below the diagram, a caption reads: "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>

まとめ

- クラウドの拡張性・柔軟性・多様なサービスを活用することで、より効率的な課題解決を目指す
- クラウドでは新しいハードウェアや様々なサービスが利用可能
特に AWS では独自チップの開発に長年投資しており、Arm HPC エコシステムの展開にも注力
- 目的に応じた設計・アーキテクチャへの考慮が重要
何をやりたいかによって前提は大きく変わってくる

本日は触れられませんでしたでしたが、SaaS 活用やMLOpsと連携した分散機械学習や大規模データ分析等、既存 HPC ユーザー以外のクラウド HPC 活用も興味深いトピック



Thank you!