FOR HEALTHCARE AND LIFE SCIENCES

最新事例に学ぶ創薬研究領域のAWSクラウド活用セミナー2023

AWSを活用したMLOpsの加速

原田 裕平

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

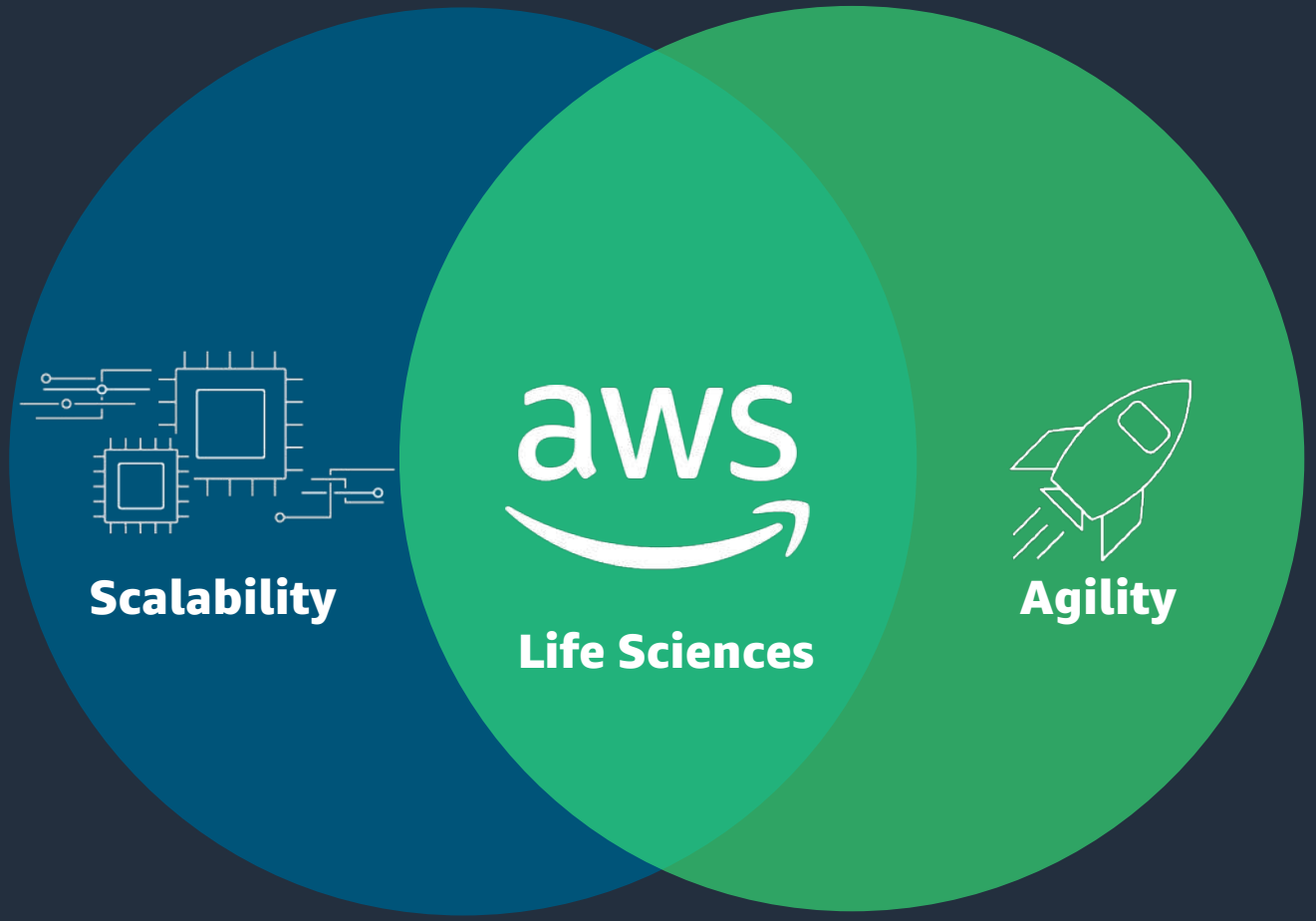
自己紹介

原田 裕平(Harada Yuhei)
yuhehara@amazon.co.jp

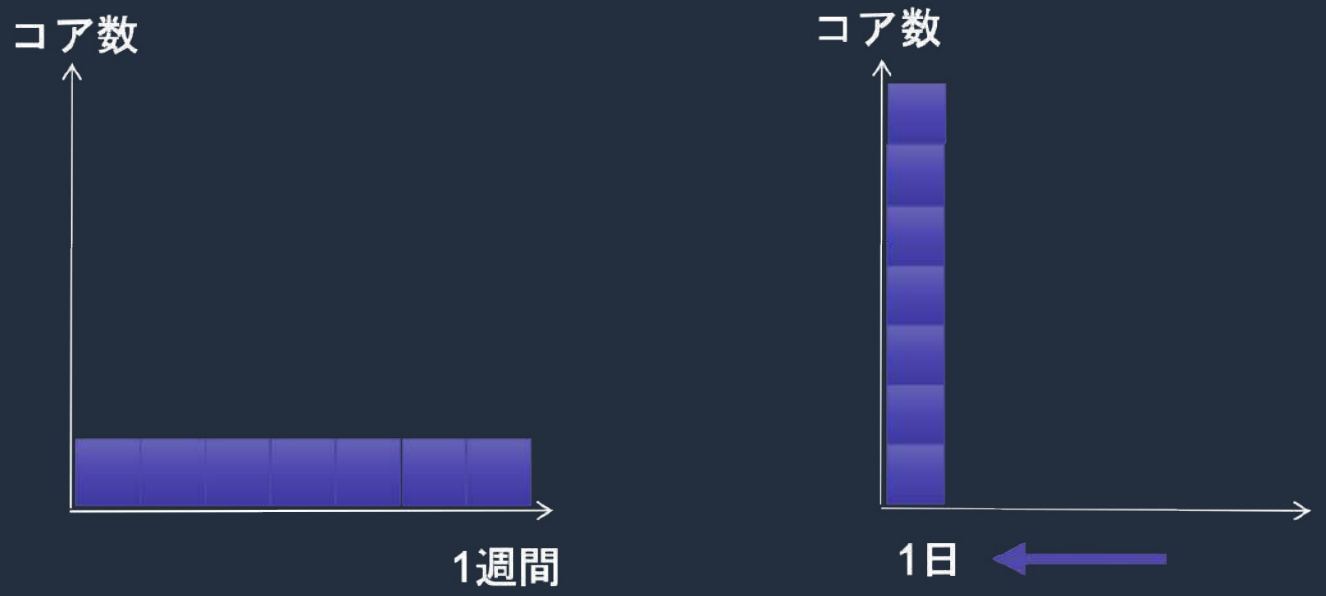
アマゾンウェブサービスジャパン合同会社
ソリューション アーキテクト

製薬業界のお客様を中心に
AWS活用をご支援しています

創薬研究におけるAWSの提供する価値



スケーラビリティによりコスト効率よく研究のスループット向上



コンピューティング費用は「時間x台数」の積算なので
逐次処理をしても並列処理をしても費用は同じ

Amazon SageMaker　AWS Batch　AWS ParallelCluster

ビルディングブロックの活用で試行錯誤のサイクルを加速

AWSはやりたいことをご自身で実現するSelf Service Platform

- 1つのサービスやツールでは自由度と実装コストの両立に限界

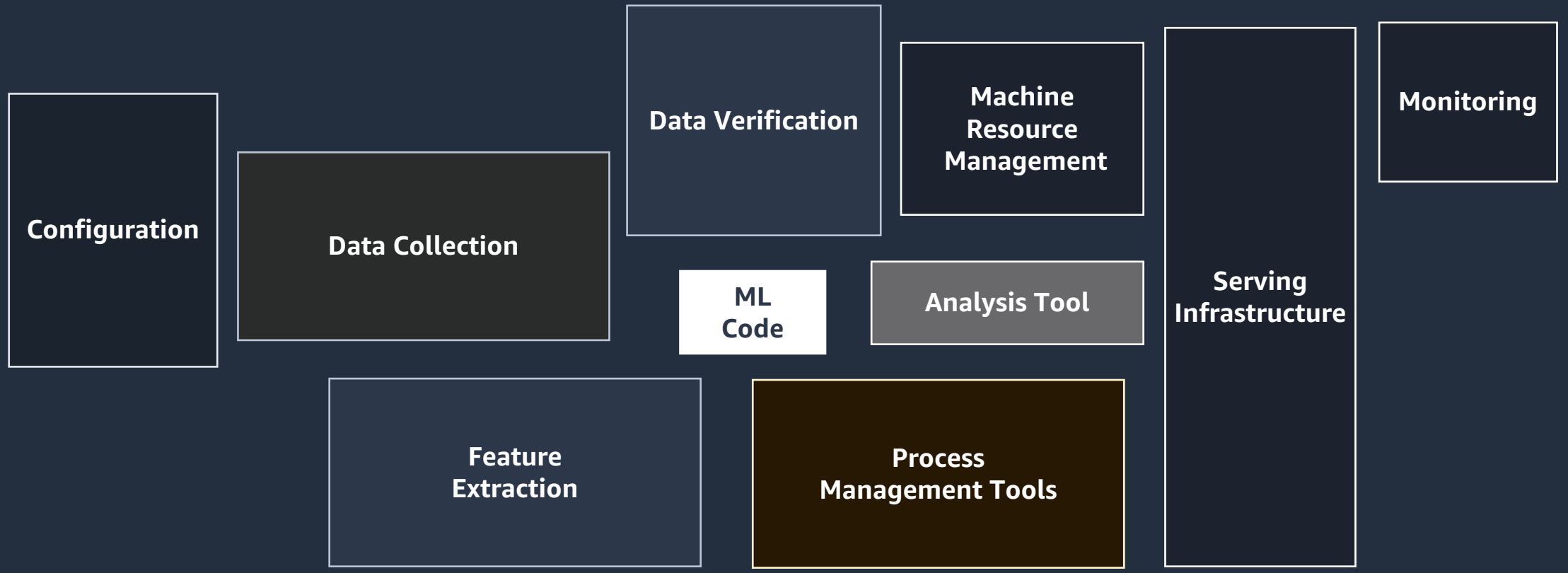
⇨**複数のサービスを適材適所で組み合わせ**、**やりたいこと**を**最小の手間**で実現する

➡ **Building Block**

http://farm4.static.flickr.com/3514/3281353786_c1a130ff2e_b.jpg

- 価値創出にフォーカス
- 失敗や試行錯誤が容易
- リードタイムの短縮

機械学習を用いた課題解決に必要な要素

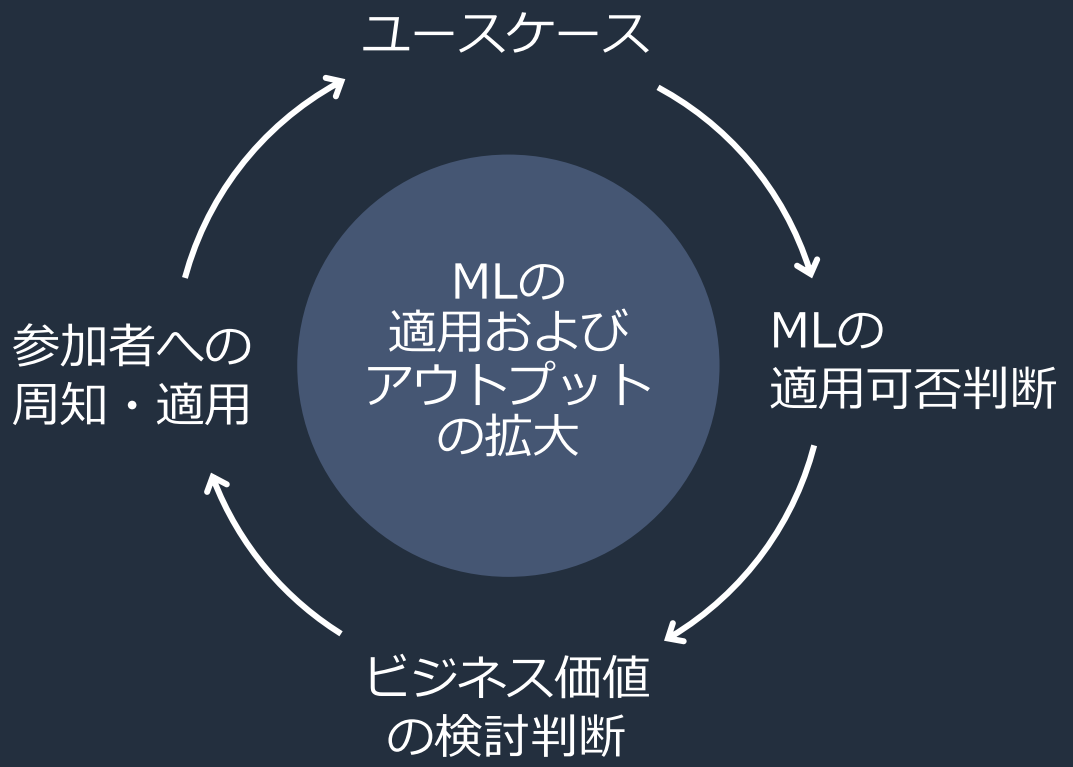


“Only a small fraction of real-world ML systems is composed of the ML code”

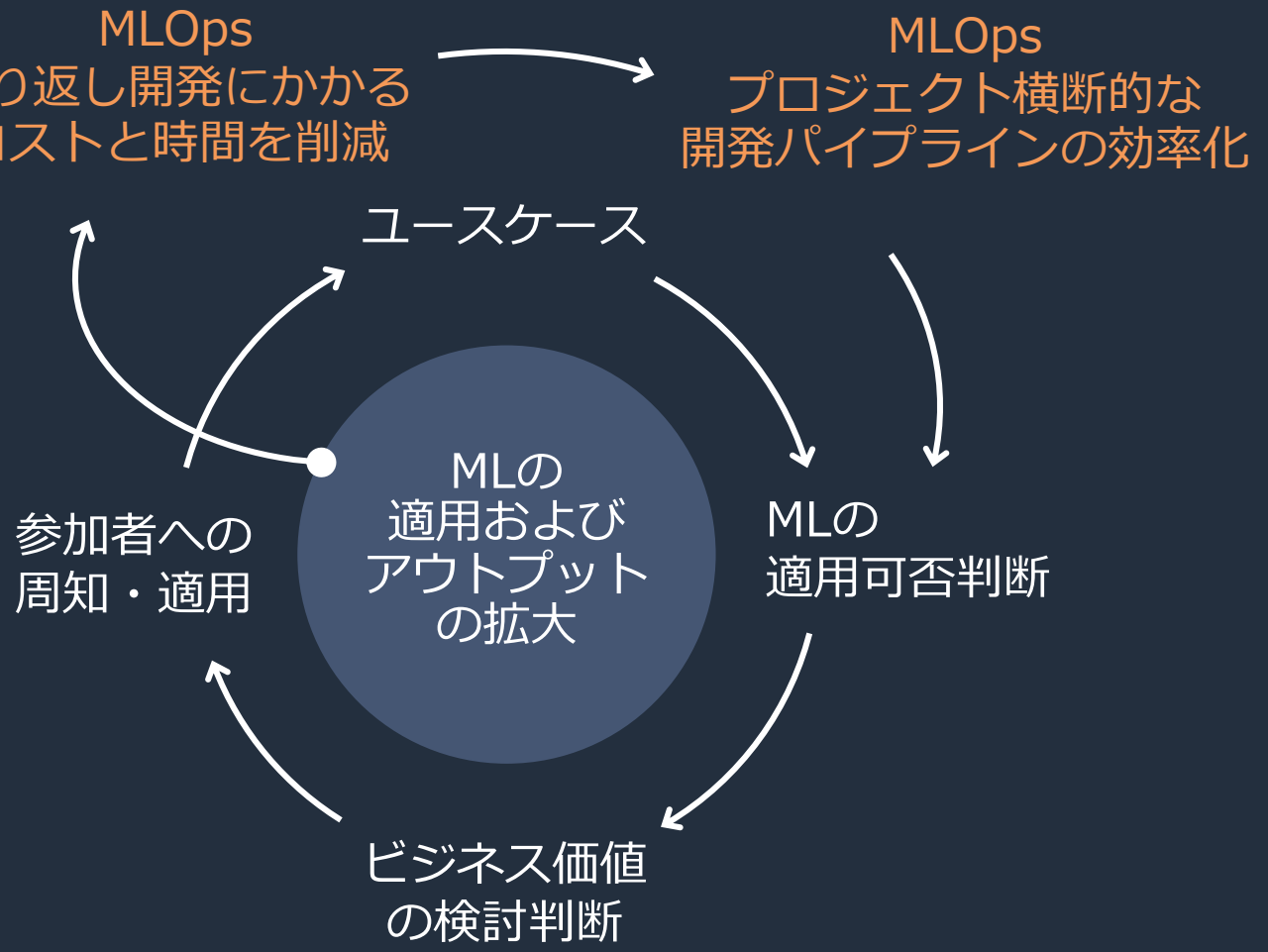
source: Hidden Technical Debt in Machine Learning Systems [D. Sculley, & al.] – 2015

https://papers.nips.cc/paper/5656-hidden-technical-debt-in-machine-learning-systems.pdf

AWSにおける機械学習フライホイール

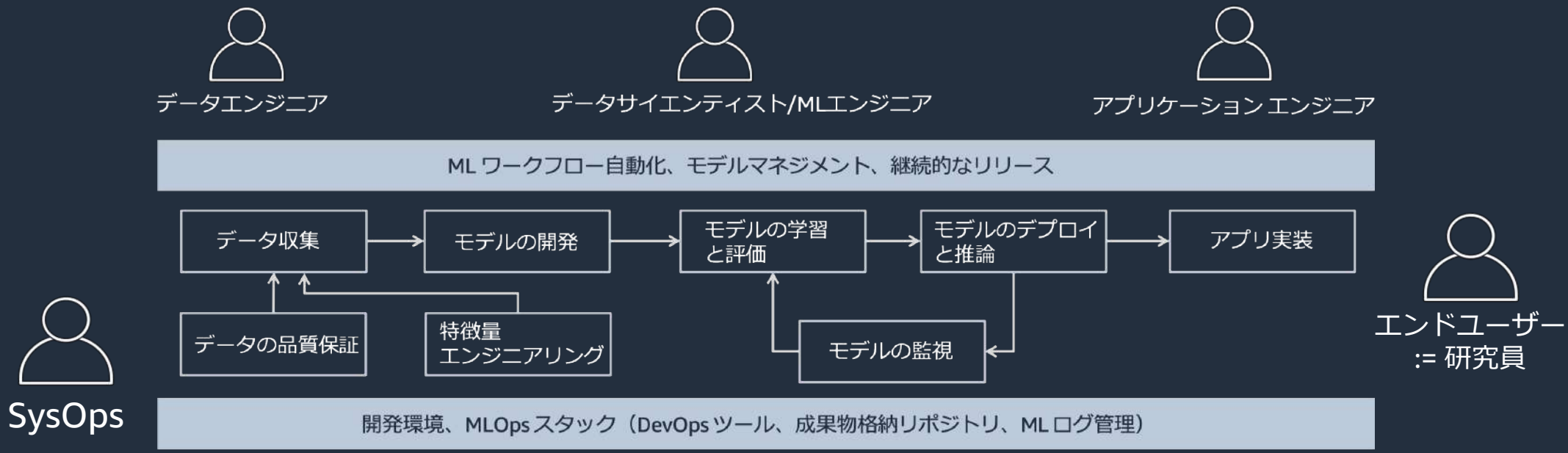


AWSにおける機械学習フライホイール



創薬研究における機械学習(ML)の課題とMLOps

1. MLの手法そのものが研究対象であり、開発には高度な専門性とドメイン知識が求められることから、小規模チームでのMLOpsの実現が求められる
2. MLアプリケーションの利用者もまた別の研究員であり、試行錯誤、開発、改善ライフサイクルが短い



創薬研究における機械学習(ML)の課題とMLOps

1. MLの手法そのものが研究対象であり、開発には高度な専門性とドメイン知識が求められることから、小規模チームでのMLOpsの実現が求められる
2. MLアプリケーションの利用者もまた別の研究員であり、試行錯誤、開発、改善ライフサイクルが短い

研究員が必要かつ重要な作業にフォーカスできる
環境およびメカニズムの構築が必要

SysOps

開発環境、MLOps スタック（DevOps ツール、成果物格納リポジトリ、ML ログ管理）

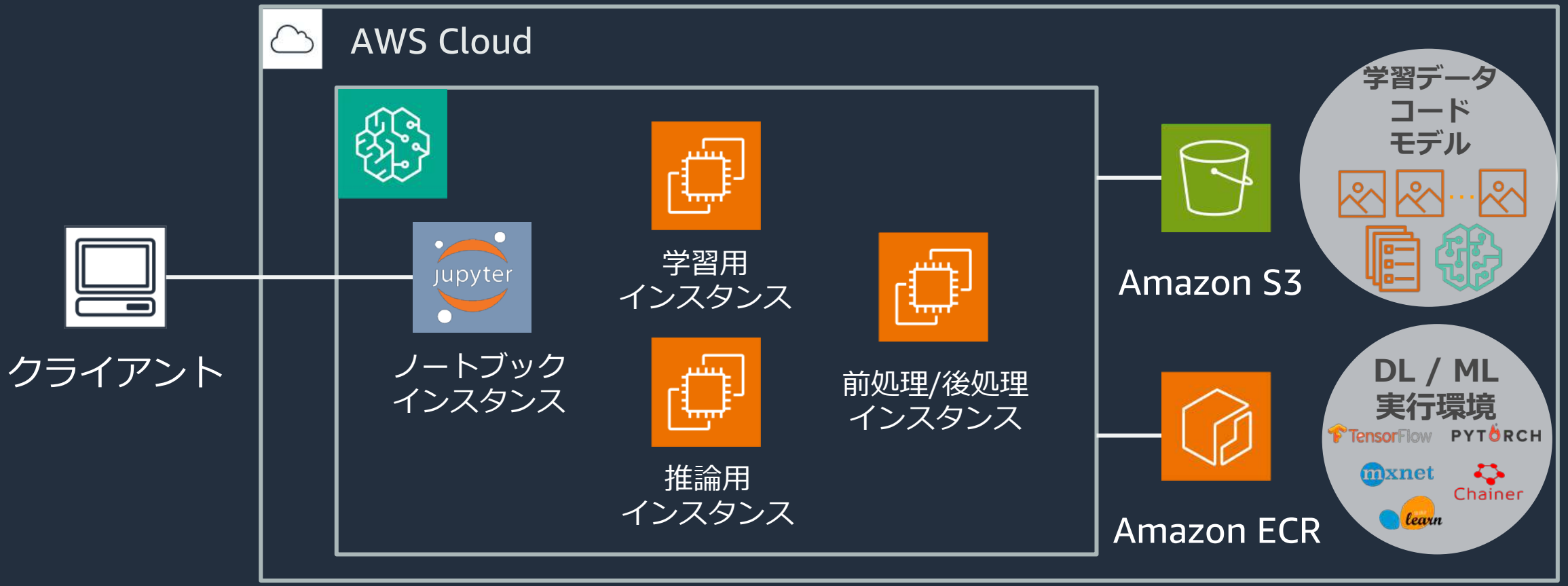
Undifferentiated Heavy Lifting

by Jeff Bezos, Founder and CEO of Amazon.com

他との差別化になりづらい重労働

Photo by Victor Freitas on Unsplash

Amazon SageMakerの基本アーキテクチャ



Amazon SageMakerの基本アーキテクチャ

チームで標準化された開発環境を迅速に構築
適切なコンピューティングリソースで試行錯誤
学習/推論/前・後処理を簡単にスケールアップ/スケールアウト

AWSでのワークフロー管理ツールの選択肢

AWS Step Functions

- サーバーレスオーケストレーション サービスを提供するサービス
- 様々なAWSサービスとの連携が用意
- 定義したステートマシンは AWS コンソールから 「ワークフロー」という形式で 見やすく可視化できる
- ステートマシンの各ステップの 実行履歴をログから追跡できる

Amazon SageMaker Pipelines

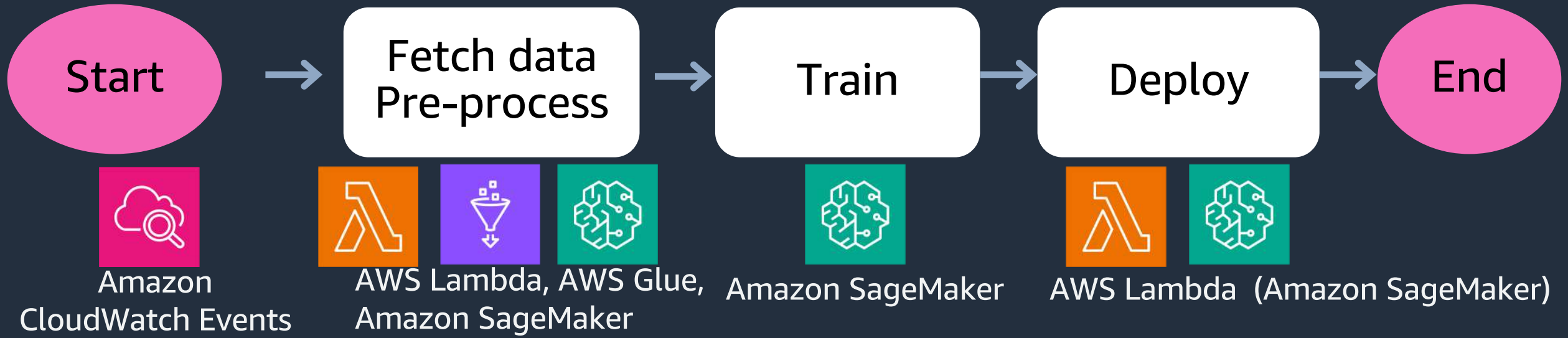
- 機械学習ワークロードの CI/CD を 実現する Amazon SageMaker の機能
- SageMaker Studio上でGUIでの開発が可能
- 各ステップの処理結果は SageMaker Experiments で記録され、 モデルの出来映えや学習パラメータ などを視覚化できる

AWS Step Functions

ASL(Amazon States Language)と呼ばれるJSON形式の言語でワークフローを定義

AWS Step Functions を使ったMLワークフロー

- AWS Lambda, Glue などにも対応したサーバーレスオーケストレーション
- AWS Step Functions Data Science SDK を使って、
  Pythonで 前処理 → 学習 → デプロイ のワークフローを作成し、可視化



https://aws.amazon.com/jp/about-aws/whats-new/2019/11/introducing-aws-step-functions-data-science-sdk-amazon-sagemaker/

AWS Step Functions を使ったMLワークフローの構築

AWS Step Functions Data Science SDK

Create the `TrainingStep` for the Workflow

```
training_step = steps.TrainingStep(
    "SageMaker Training Step",
    estimator=sklearn,
    data={"train": sagemaker.s3_input(preprocessed_training_data, content_type="csv")},
    job_nam
    wait_fo
)
```

各ステップを数行のPythonコードで記述

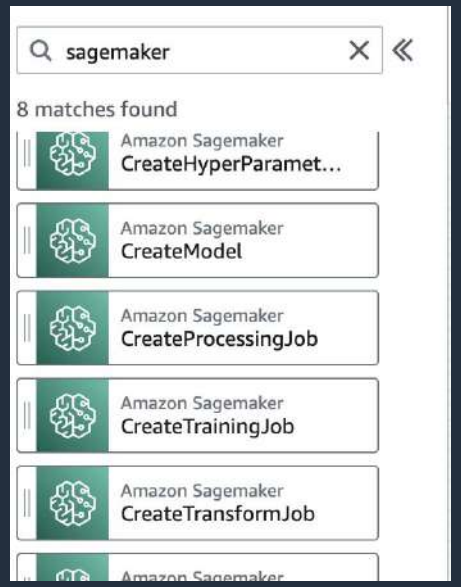
Create and execute the `Workflow`

```
workflow_graph = Chain([processing_step, training_step, processing_evaluation_step])
branching_workflow = Workflow(
    name="SageMakerProcessingWorkflow",
    definition=workflow_graph,
    role=workflow_execution_role,
)

branching_workflow.create()

# Execute wor
execution =
    inputs=
        "Pr
e name,
        "Tr
        "Ev
    }
)
execution_o
```

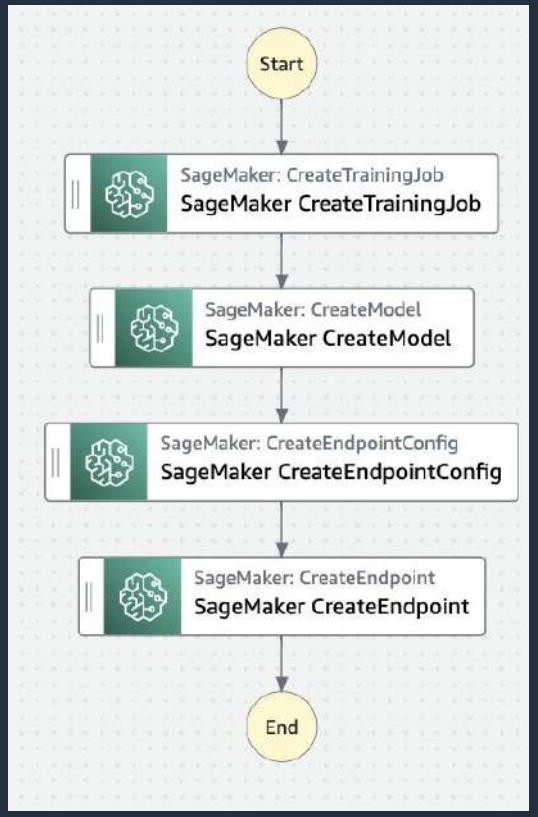
ステップを Chain させて Workflow を定義し、作成、実行を行う

https://aws-step-functions-data-science-sdk.readthedocs.io/en/stable/

AWS Step Functions Workflow Studio



https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/define-and-run-machine-learning-pipelines-on-step-functions-using-python-workflow-studio-or-states-language/



aws FOR HEALTHCARE AND LIFE SCIENCES

Thank you!

Yuhei Harada
yuhehara@amazon.co.jp