

PyZAP～研究所まるごとDXへの挑戦～

中外製薬株式会社

モダリティ基盤研究部 平山、角崎、長島

2023年6月29日



- ① 創薬研究のDXはチャレンジング
- ② Python普及活動 PyZAPの紹介
- ③ PyZAPを支えるAWSインフラ
- ④ WET(実験) × DRY(アプリ開発) = 二刀流
- ⑤ まとめ



研究所発のPython学習プログラムPyZAP（パイザップ）ウェットとドライの研究を橋渡しし、研究開発力の底上げに挑む！

♡ 34

 CHUGAI DIGITAL | 中外製薬
2023年5月11日 09:00



創薬研究のDXはチャレンジング

- 研究所においては多様な研究領域、モダリティ、研究資材に加えて、実験機器・研究手法の日進月歩な高度化により、量と種類の観点で複雑性が増すばかり。

○ 各分野の専門家がデータ取得



○ データの多様性が高い



このような広範で専門性の高い領域をDRYの研究員のみでカバーするのは不可能

創薬研究のDXはチャレンジング

- 多種多様なデータの価値や意味を一番理解しているのは実験を行った**研究者自身**。
- **WET研究者**が自身でデータの管理や解析できる、所謂**DRY領域**へ踏み込むことで広範な研究領域をカバーし**DRY**×**WET**のシナジーが期待できる。

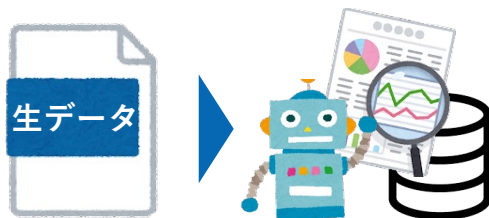


では、WET研究者が身につけるべきDRYスキルは何か？



データを「**成型**」×「**可視化**」できるスキル

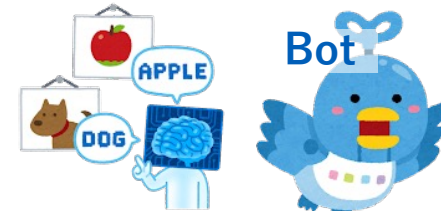
○ 研究現場におけるDRY系タスクは「**データ成型**」と「**可視化**」で事足りる



実験機器から出てくるデータを「**成型**」



「**可視化**」により今まで見えなかったデータが見れるように

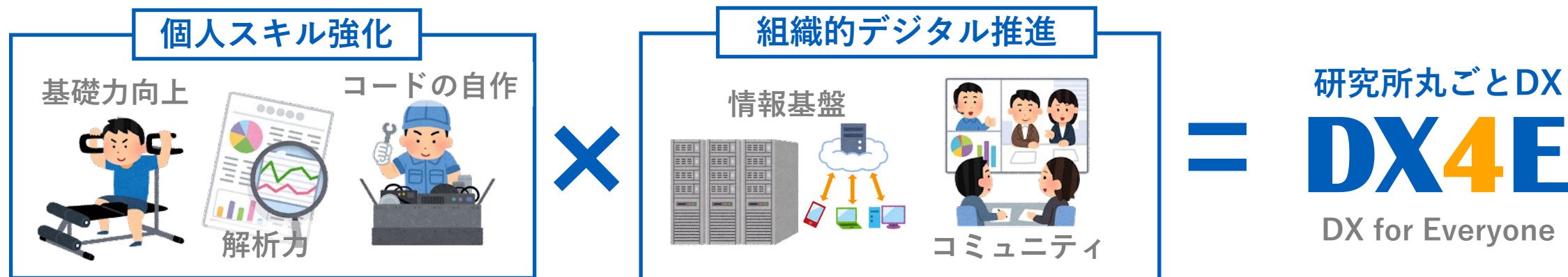


より高度なプログラミングへ発展

WET研究員にPythonを普及させたい

Python普及活動 PyZAP

- PyZAPは「chugai Pythonista RISE UP program」の略で、研究員がPythonを習得し、組織・研究機能の業務を自身で変革してもらう活動
- 「個人スキル強化」と「組織的デジタル推進」の両輪で「研究所丸ごとDX」
 - ✓ 個人スキル強化：WET研究員自らコードを書き「データ成型」と「可視化」できる
 - ✓ 組織のデジタル推進力：情報基盤とコミュニティを構築し、相互に協力できる環境を整備



個人スキル強化と組織的デジタル推進により研究所丸ごとDX

Python普及活動 PyZAP

• PyZAPを支える3つの柱

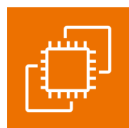
①技術選択



身につけるスキルをフォーカス

- ・プログラミング言語 ⇒ Python
- ・開発環境 ⇒ JupyterHub
- ・アプリ開発フレームワーク ⇒ Streamlit

②インフラ



Amazon Elastic Compute Cloud (Amazon EC2)



Amazon Relational Database Service (Amazon RDS)



Amazon Elastic Container Registry (Amazon ECR)

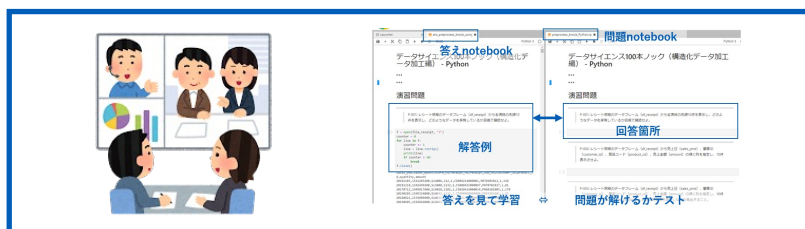


Amazon SageMaker

AWS活用により迅速に学習環境構築 & スケーリング

- ・初期はAmazon EC2×1台の上のJupyterHub
- ・Amazon SageMakerで学習環境のスケールアップ

③開催形式



コミュニティの構築を意識

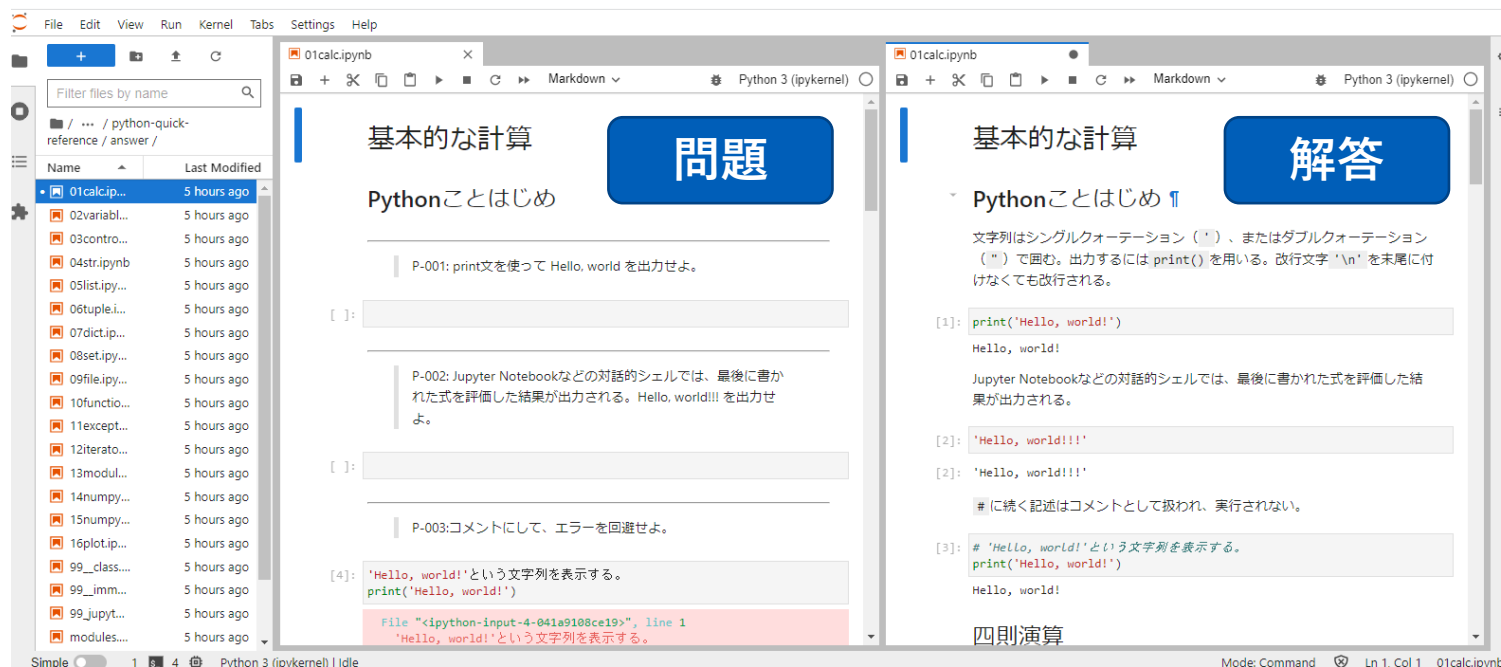
- ・チーム制での勉強会(週一回)
- ⇒ 研究領域の近いメンバーでコミュニティ醸成

PyZAPを支える3つの柱

Python普及活動 PyZAP

• 教材・開催形式

- ✓ ドリル形式のJupyter Notebookを用意(問題と解答)。
- ✓ 毎週問題を解いてきてもらい1週間に1回の解説会を実施。受講者に自身の解答を解説して貰う。
- ✓ DRY系研究員もしくはPyZAP卒業生が講師となって自部署のメンバーをトレーニング。



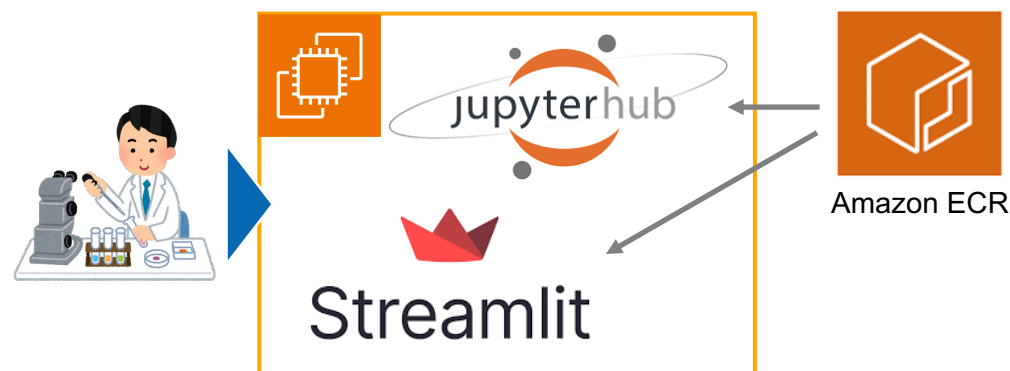
ドリル形式で手練れるまで反復練習

PyZAPを支えるAWSインフラ

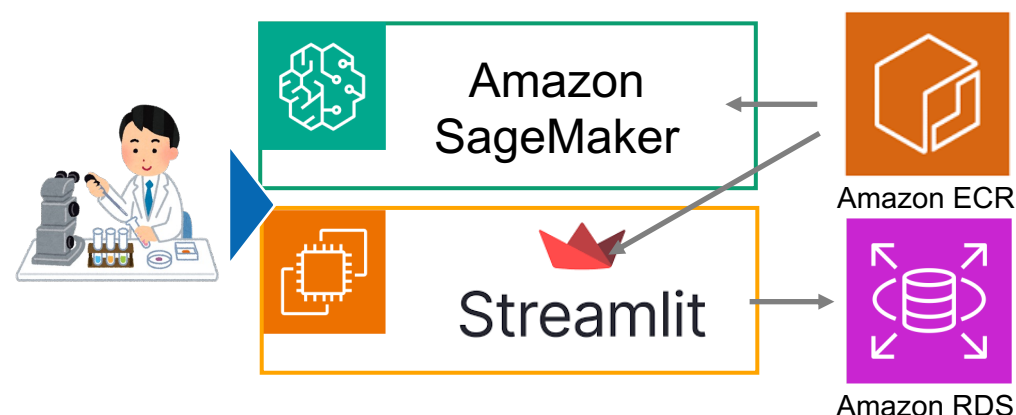
• 学習環境をスモールスタートからスケールアップ

- ✓ PyZAPスタート時は30名程度であったためAmazon EC2 × 1台上にJupyterHub環境を構築
- ✓ 現在受講生が100名を超えたため、Amazon SageMaker Studioの利用を開始

○ スモールスタート環境(30ユーザ)



○ スケール後環境(100ユーザ以上)



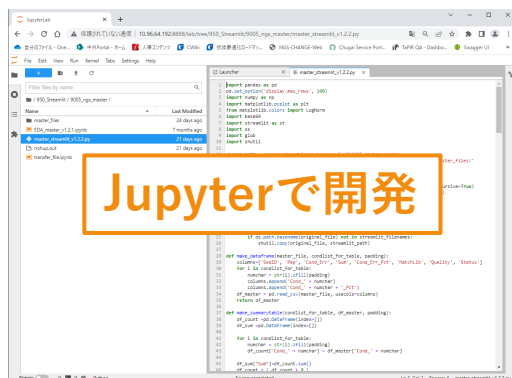
クラウドを活用し展開規模に応じて解析環境をスケールアップ

WET(実験) × DRY(アプリ開発) = 二刀流

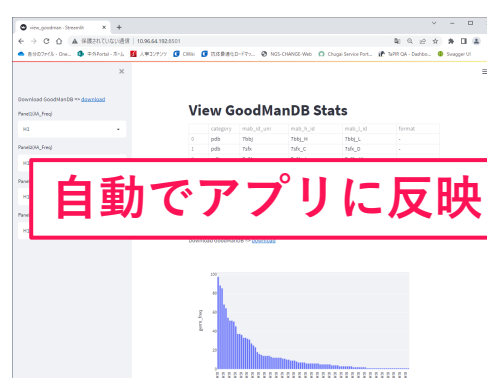
- 当初PyZAPは「データ成型」および「可視化」スキルの獲得を目標としていた。
- 他の研究者に自身の開発したツールを使ってもらうためにアプリ化したいという声も多く、Jupyter × Streamlit環境 on Amazon EC2を提供したところ、Webアプリ開発もできる二刀流研究者が急増。

Jupyter × **Streamlit** on Amazon EC2
「Python & ブラウザだけ」で開発からサービス提供まで全て完結





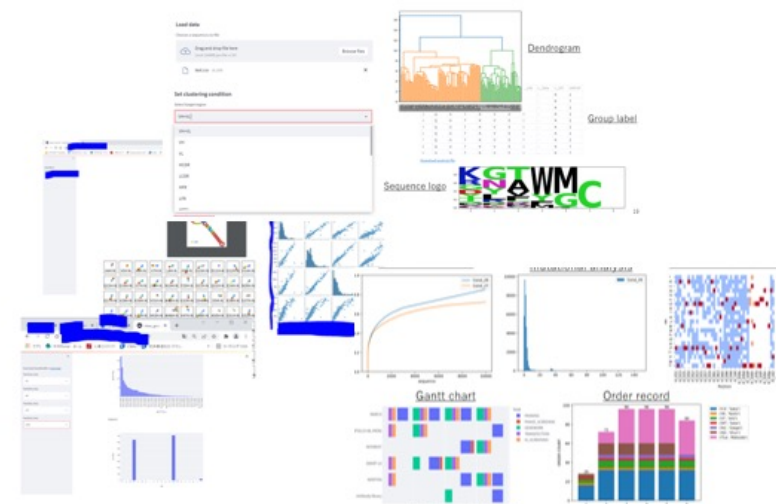
Jupyterで開発



自動でアプリに反映

ブラウザだけでWebアプリ開発

WET研究者が自らWebアプリを開発し、業務効率化 & 新たなInsight獲得



WET × DRYの二刀流

アプリ開発もできるWET研究者(二刀流研究者)が 20名以上!

- 研究所のDX課題を解決すべく、Python普及活動「PyZAP」を推進
- 「JupyterHub × Streamlit on EC2」によりWET研究員の二刀流化に成功
- AWSの利用で、スモールスタート⇒スケールアップまで迅速・柔軟に対応

創造で、想像を超える。