



PIPELINE PILOT WEBINAR

シリーズ：第一回

研究開発向けWEBアプリ作成の基本,
データの整理・可視化



3DEXPERIENCE®

本日の内容

Pipeline Pilot Webinarシリーズについて

ソリューション紹介

Webアプリの活用例

デモ内容の紹介・デモ

まとめ

PIPELINE PILOT WEBINARシリーズについて

PIPELINE PILOT WEBINARシリーズについて

- BIOVIA Pipeline PilotとWeb Portを用いることで、化学構造式を含む幅広い科学的なデータの処理とWebアプリの作成が可能となります
- データからの新しい知見の獲得や一研究グループの業務効率化に、さらには材料探索から評価・解析に至る様々な場面で活用いただけます
- 本ウェビナーシリーズでは下記の内容の実施を想定しております

#	タイトル・内容
1	研究開発向けWebアプリ作成の基本、データの整理・可視化
2	バーチャル化合物ライブラリの作成
3	簡単に始める機械学習：予測モデル作成と活用

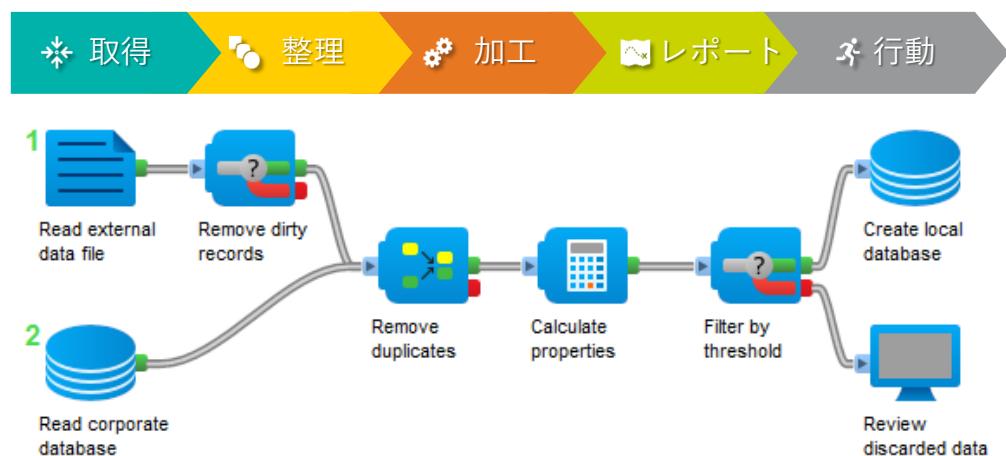
※タイトル・内容は変更になる場合があります



ソリューション紹介

BIOVIA Pipeline Pilot

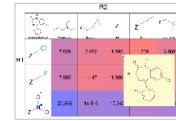
統計解析や機械学習をはじめとしたデータ処理・データ解析のプロトコルを、
ローコードで作成可能なデータサイエンスソフトウェア



<様々なデータに対応>

Sl. No.	ΔA	ΔB	ΔC	Fatigue
1	0.07	0	0.04	232
2	0.11	0	0.04	235
3	0.07	0.02	0	235
4	0.09	0	0.1	245
5	0.04	0.02	0	235
6	0.06	0.02	0.02	245
7	0.08	0.01	0	235
8	0.07	0	0	245
9	0.08	0	0.03	235
10	0.04	0.03	0	239
11	0.11	0	0	235

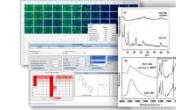
数値



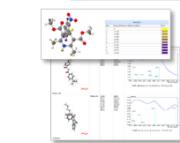
化学構造式



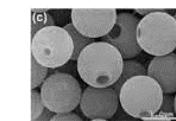
自然言語



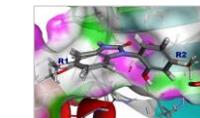
分析機器



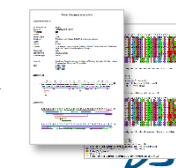
三次元
有機/無機材料



画像



三次元
タンパク質構造



遺伝子配列

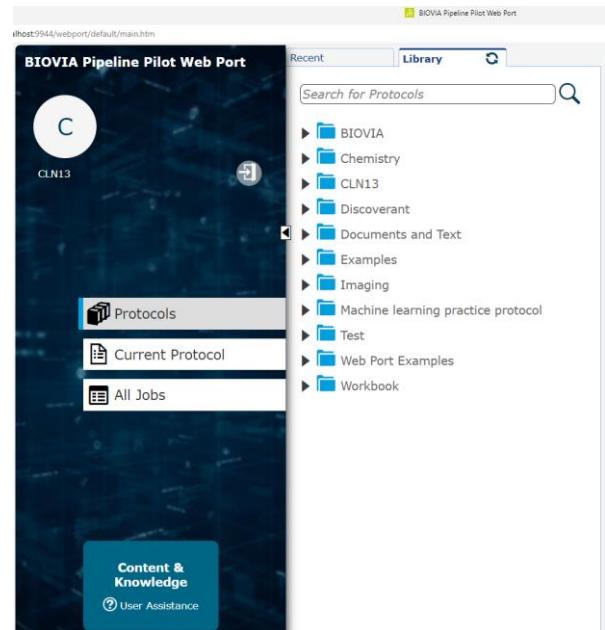
- データ処理、データ分析、レポート作成
- 機械学習、予測モデリング、画像解析、回帰分析 etc.

WEB PORT

Web Portとは

- Pipeline Pilotで構築したプロトコルをWebアプリとして公開・利用可能なソリューション
- Webアプリのインターフェースも非常に柔軟性高く構築可能

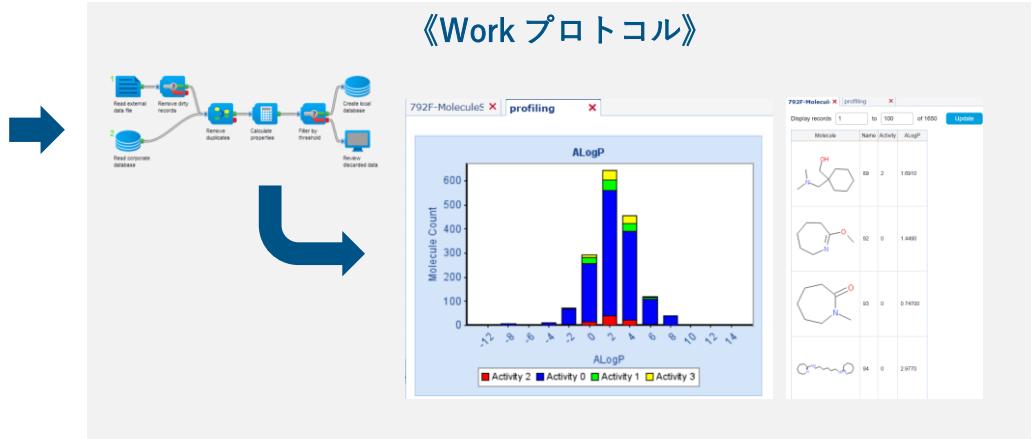
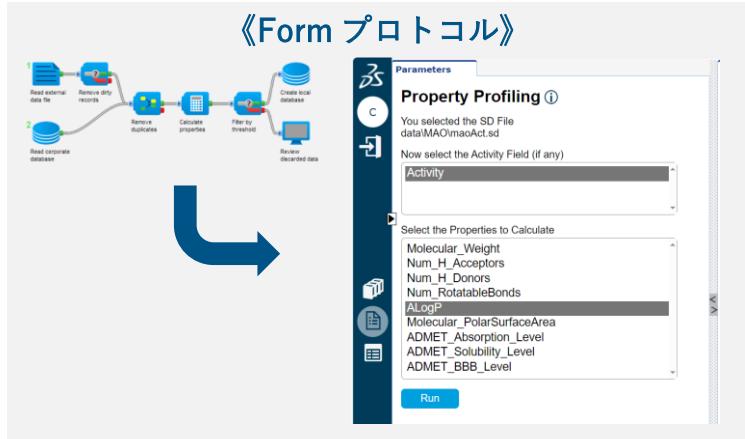
- Pipeline Pilotユーザーは以下を実行
 - インターフェースの作成
 - 入力フォームに従ってデータ処理のフローを作成
 - Web Port機能を利用してウェブ上にアプリケーションとして公開
- 一般ユーザーはウェブ上で各種アプリケーションを利用
 - 作成されたインターフェースを利用
 - 出力される結果を参照



WEB PORTの仕組み

Form Protocol & Work Protocol

Formプロトコルで指定されたソースデータ・入力された値を用いてWorkプロトコルでデータを処理



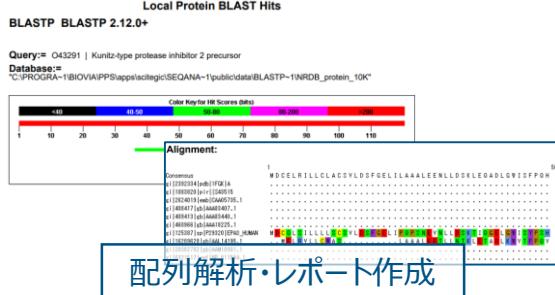
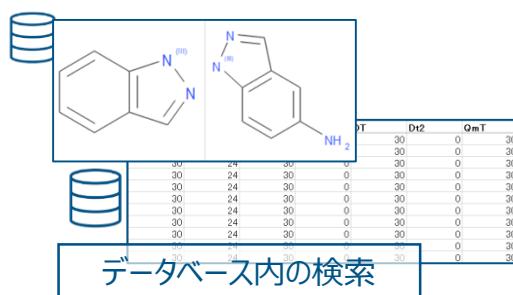
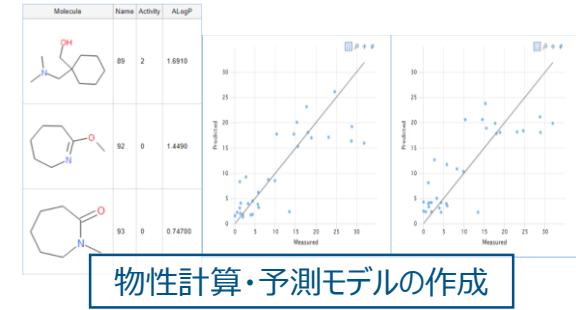
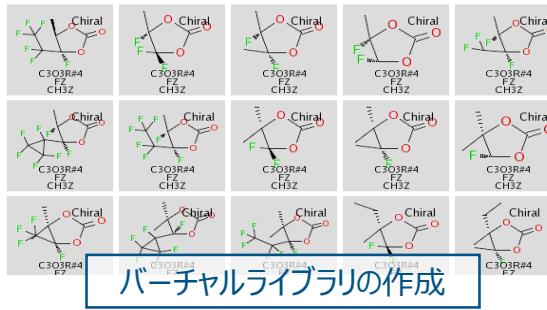
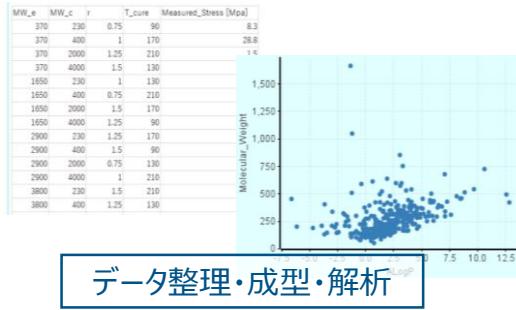
- ソースデータやパラメータの指定をするインターフェースを構築するプロトコル
- 必要な設定
 - ソースデータを指定する項目
 - 各種パラメータを指定する項目
 - Workプロトコルとの紐づけ
 - 実行ボタンの配置など
- インターフェースを構築するためのコンポーネントを多数用意

- 選択されたソースデータに対し指定されたパラメータの元、結果を出力するプロトコル
- 多種多様なレポーティング機能を利用可能

WEBアプリの活用例

WEBアプリの活用例

- 研究開発業務の中で取得した数値データや化学構造データを分析、解析するツールの構築
- 特定のテーマ、特定のプロジェクトで一時的に必要なアプリケーションを外部委託せず構築
- データの前処理や繰返し行う定型化されたデータ処理を自動化するツールの構築



Page 1 User ID

Purchase List Number: 32

¥141-0032 東京都品川区大崎2丁目1-1, (+81)03-4321-3500

Laboratory Equipment Event: 2024-07-110932 Shipment Date: 2024/03/22

Reported To: Purchase ID: 23XXXXXX Shipment ID: XXXXXX

Laboratory Equipment Purchasing List Form

Item	Catalog No.	Quantity	Experiment Type	Permissions Needed
Aspirators for vacuum filtration	AP1136	3	A	No
Balances	AP1184	1	A	No
Digital micropipets, 2-20 uL	AP1185	6	A	No

Some purchasers need permissions from superiors. Permission application forms should be submitted with the purchase item.

Report Run Date: 07/22/24

Reviewed By: _____ Date: _____

申請書の作成

DASSAULT SYSTEMES

本日のデモ内容の紹介

本日のデモ内容

目標：入力条件により、相応の配合及び物性データテーブルとプロット図を出力させる
準備：入力フォーム(Form) & テーブルとプロット図を出力するプロトコル(Work)

Parameters

配合及び物性データテーブル ⓘ

条件の指定

添加剤 CP55 範囲

1 ~ 100

二酸化硫黄 範囲

~

pH 最小値

Back Run



Formプロトコルによる入力フォーム



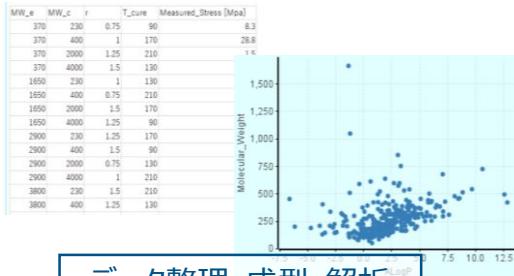
Workプロトコルによる処理結果

まとめ

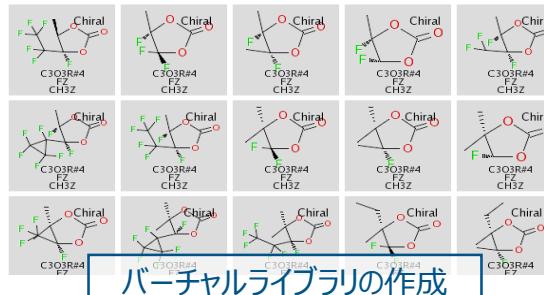
まとめ

研究開発向けWEBアプリ作成の基本、データの整理・可視化

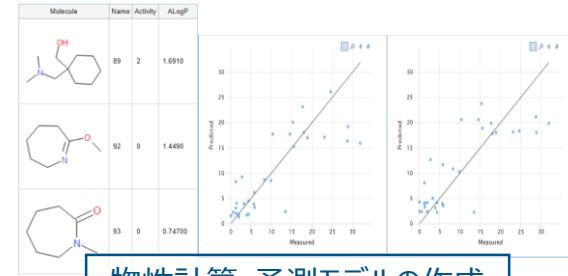
- ・研究開発業務の中で取得した数値データや化学構造データを分析、解析するツールの構築
 - ・特定のテーマ、特定のプロジェクトで一時的に必要なアプリケーションを外部委託せず構築
 - ・データの前処理や繰返し行う定型化されたデータ処理を自動化するツールの構築



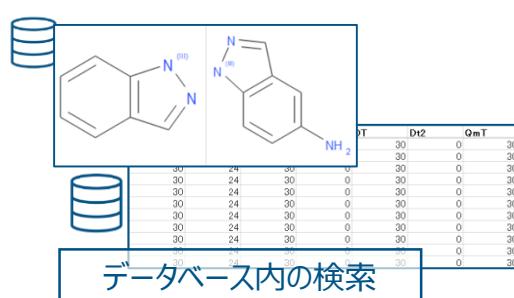
データ整理・成型・解析



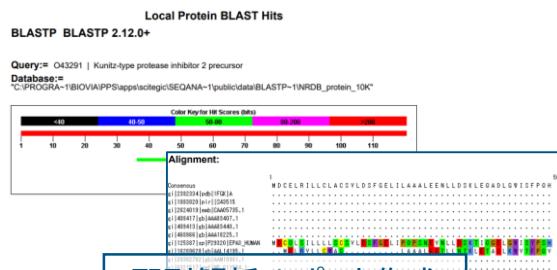
バーチャルライブラリの作成



物性計算・予測モデルの作成



データベース内の検索



配列解析・レポート作成

Purchase List Number: 32					Page 1  User ID: 123456	
					T-141-0032 東京都品川区大崎2丁目1-1 +(81)03-4321-3500	
					Laboratory Equipment Event: 2024-07-110938 Shipment Date: 2024/03/22	
					Reported To: Purchase ID: 32XXXXXX Shipment ID: XXXXXX	
アソシエイト 指定研究室 Joey LIN - Level C Research Assistant						
Laboratory Equipment Purchasing List Form						
Item	Catalog No.	Quantity	Experiment Type	Permissions Needed		
Aspirators for vacuum filtration	AP1100	3	A	No		
Balustrade	AP1800	1	A	No		
Digital microscopes, 2.20x4L	AP1805	6	A	No		
Some purchases need permissions from superiors.				Reviewed By: _____		
Permission application forms should be submitted with the purchase request.				Date: _____		
Report Run Date: 07/22/24						

申請書の作成

PIPELINE PILOT WEBINARシリーズについて

- BIOVIA Pipeline PilotとWeb Portを用いることで、化学構造式を含む幅広い科学的なデータの処理とWebアプリの作成が可能となります
- データからの新しい知見の獲得や一研究グループの業務効率化に、さらには材料探索から評価・解析に至る様々な場面で活用いただけます
- 本ウェビナーシリーズでは下記の内容の実施を想定しております

#	タイトル・内容
1	研究開発向けWebアプリ作成の基本、データの整理・可視化
2	バーチャル化合物ライブラリの作成
3	簡単に始める機械学習：予測モデル作成と活用

※タイトル・内容は変更になる場合があります



