



# 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

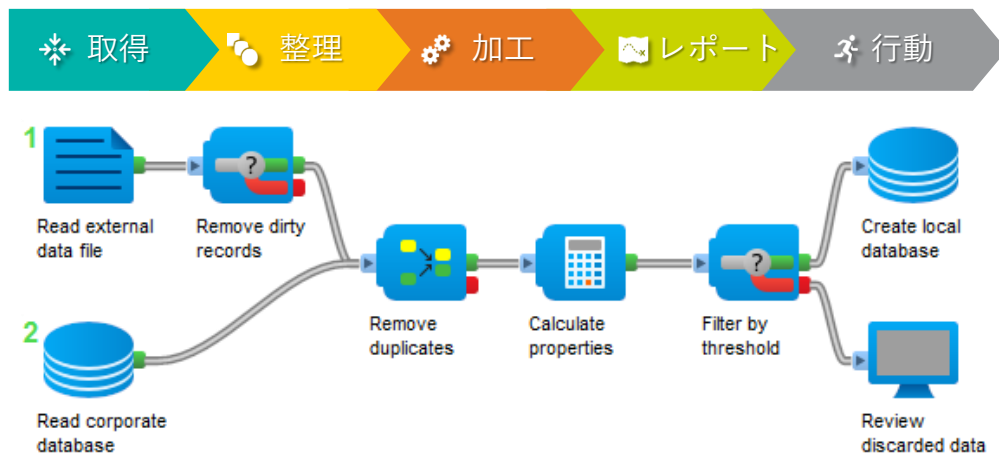
※タイトル・内容は変更になる場合があります



# ソリューション紹介

# BIOVIA Pipeline Pilot

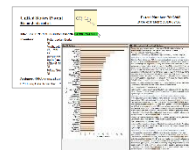
統計解析や機械学習をはじめとしたデータ処理・データ解析のプロトコルを、  
ローコードで作成可能なデータサイエンスソフトウェア



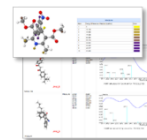
< 様々なデータに対応 >

Sl. No.	GA	GB	HC	Pathway
1	0.07	0.02	0.04	232
2	0.11	0	0.04	235
3	0.07	0.02	0	235
4	0.06	0	0	241
5	0.04	0.02	0	235
6	0.06	0.02	0.02	245
7	0.06	0.07	0	235
8	0.07	0	0	245
9	0.06	0	0.04	275
10	0.04	0.02	0	235
11	0.11	0	0	255

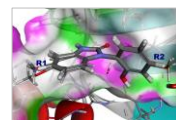
数値



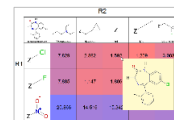
自然言語



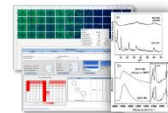
三次元  
有機/無機材料



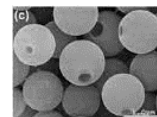
三次元  
タンパク質構造



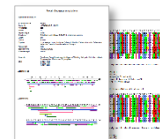
化学構造式



分析機器



画像



遺伝子配列

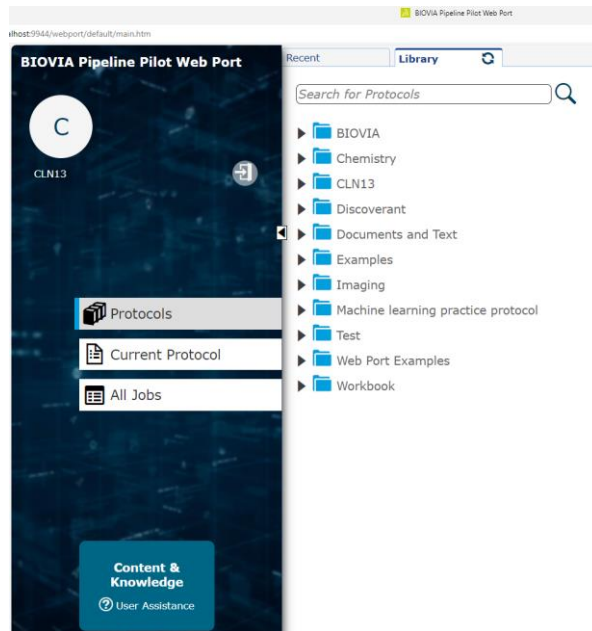
- データ処理、データ分析、レポート作成
- 機械学習、予測モデリング、画像解析、回帰分析 etc.

# 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

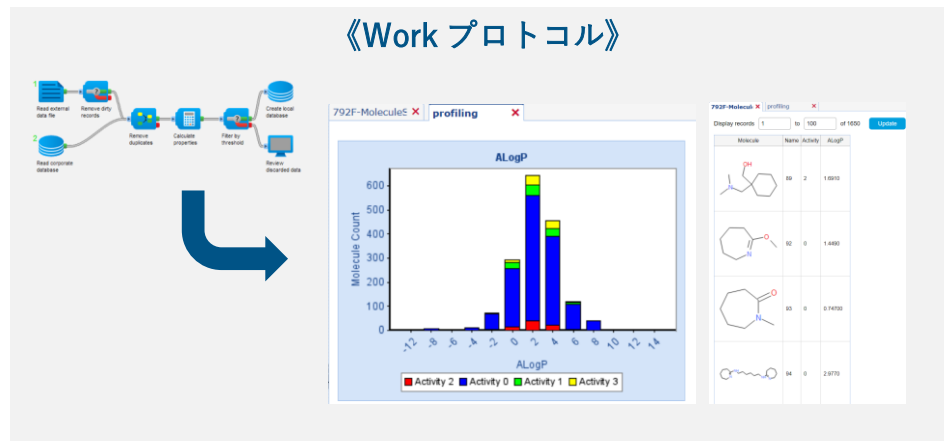
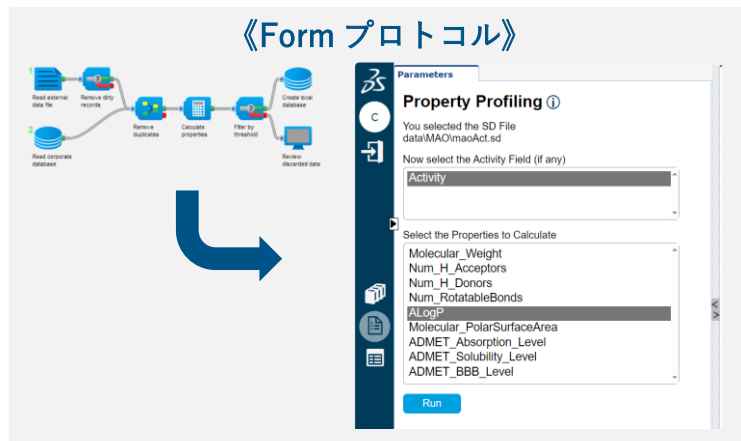
- Pipeline Pilotユーザーは以下を実行
  - インターフェースの作成
  - 入力フォームに従ってデータ処理のフローを作成
  - Web Port機能を利用しウェブ上にアプリケーションとして公開
- 一般ユーザーはウェブ上で各種アプリケーションを利用
  - 作成されたインターフェースを利用
  - 出力される結果を参照



# 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
- 多種多様なレポート機能を利用可能



# WEBアプリの活用例

- | MW_c | MW_c | $\gamma$ | $T_{cure}$ | Measured_Stress [Mpa] |
|------|------|----------|------------|-----------------------|
| 370  | 230  | 0.75     | 90         | 6.3                   |
| 370  | 400  | 1        | 170        | 26.8                  |
| 370  | 2000 | 1.25     | 210        | 16                    |
| 370  | 4000 | 1.5      | 130        |                       |
| 1650 | 230  | 1        | 130        |                       |
| 1650 | 400  | 0.75     | 210        |                       |
| 1650 | 2000 | 1.5      | 170        |                       |
| 1650 | 4000 | 1.25     | 90         |                       |
| 2900 | 230  | 1.25     | 170        |                       |
| 2900 | 400  | 1.5      | 90         |                       |
| 2900 | 2000 | 0.75     | 130        |                       |
| 2900 | 4000 | 1        | 210        |                       |
| 3800 | 230  | 1.5      | 210        |                       |
| 3800 | 400  | 1.25     | 130        |                       |

Molecule	Name	Activity	ALogP <sup>a</sup>
	89	2	1.6910
	92	0	1.4490
	93	0	0.74700

[illegible][illegible]

Page 1
User ID

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

Purchase List Number: 32

Laboratory Equipment  
Event: 2024-07-110938  
Shipment Date: 2024/03/22

Laboratory Equipment Purchasing List Form				
Item	Catalog No.	Quantity	Experiment Type	Permissions Needed
Aspirators for vacuum filtration	AP1136	3	A	No
Sonomixer	AP1584	1	A	No
Digital microscale, 2.20 ul	AP1805	6	A	No

Some purchases need permissions from superintendents.

Permission application forms should be submitted with the purchase form.

Report Run Date: 07/22/24

Reviewed By: \_\_\_\_\_ Date: \_\_\_\_\_



# 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

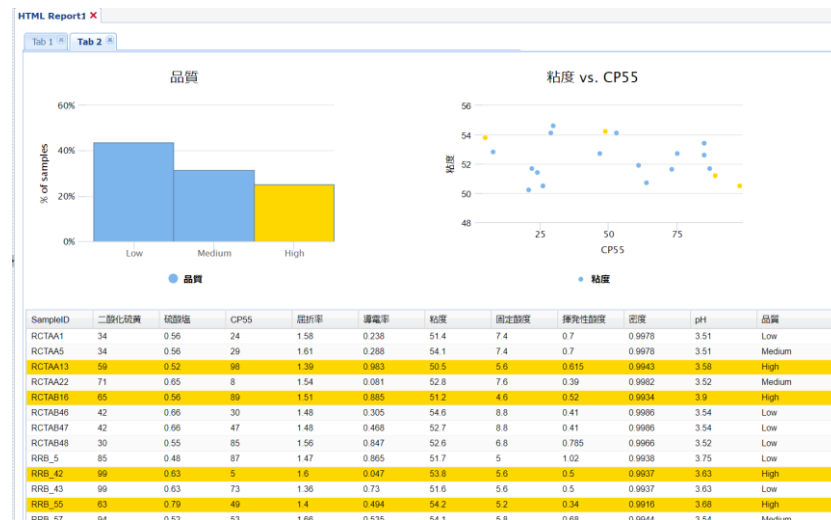
**二酸化硫黄 範囲**

~

**pH 最小値**

~

**Back Run**



Formプロトコルによる入力フォーム

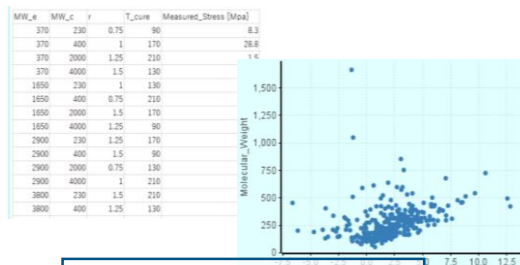
Workプロトコルによる処理結果

# まとめ

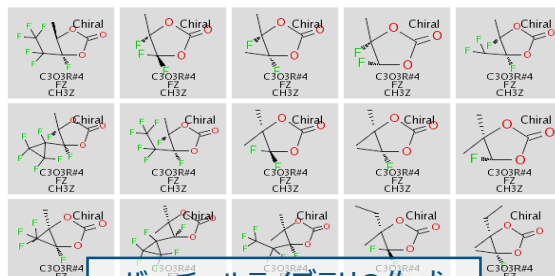
## まとめ

# 研究開発向けWEBアプリ作成の基本，データの整理・可視化

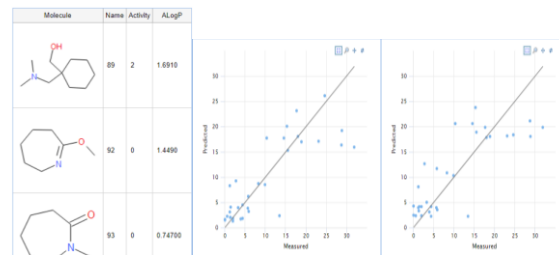
- ・ 研究開発業務の中で取得した数値データや化学構造データを分析、解析するツールの構築
- ・ 特定のテーマ、特定のプロジェクトで一時的に必要なアプリケーションを外部委託せず構築
- ・ データの前処理や繰返し行う定型化されたデータ処理を自動化するツールの構築



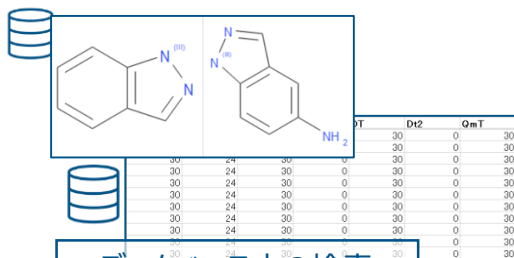
## データ整理・成型・解析



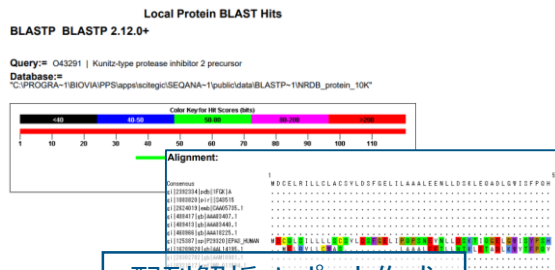
## バーチャルライブラリの作成



## 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

Page 1
User ID

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

Purchase List Number: 32

Laboratory Equipment  
Event: 2024-07-110938  
Shipment Date: 2024/03/22

Joey LIN - Level C Research Assistant

Laboratory Equipment Purchasing List Form				
Item	Catalog No.	Quantity	Expenditure Type	Permissions Needed
Aspirators for vacuum filtration	AP1136	3	A	No
Spectrometer	AP1884	1	A	No
Digital microscopes, 2.00 µm	AP1805	6	A	No

\*Some purchases need permissions from superintendents.  
 Permission application forms should be submitted with the purchase form.

Reviewed By: \_\_\_\_\_ Date: \_\_\_\_\_  
 Report Run Date: 07/22/24

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



