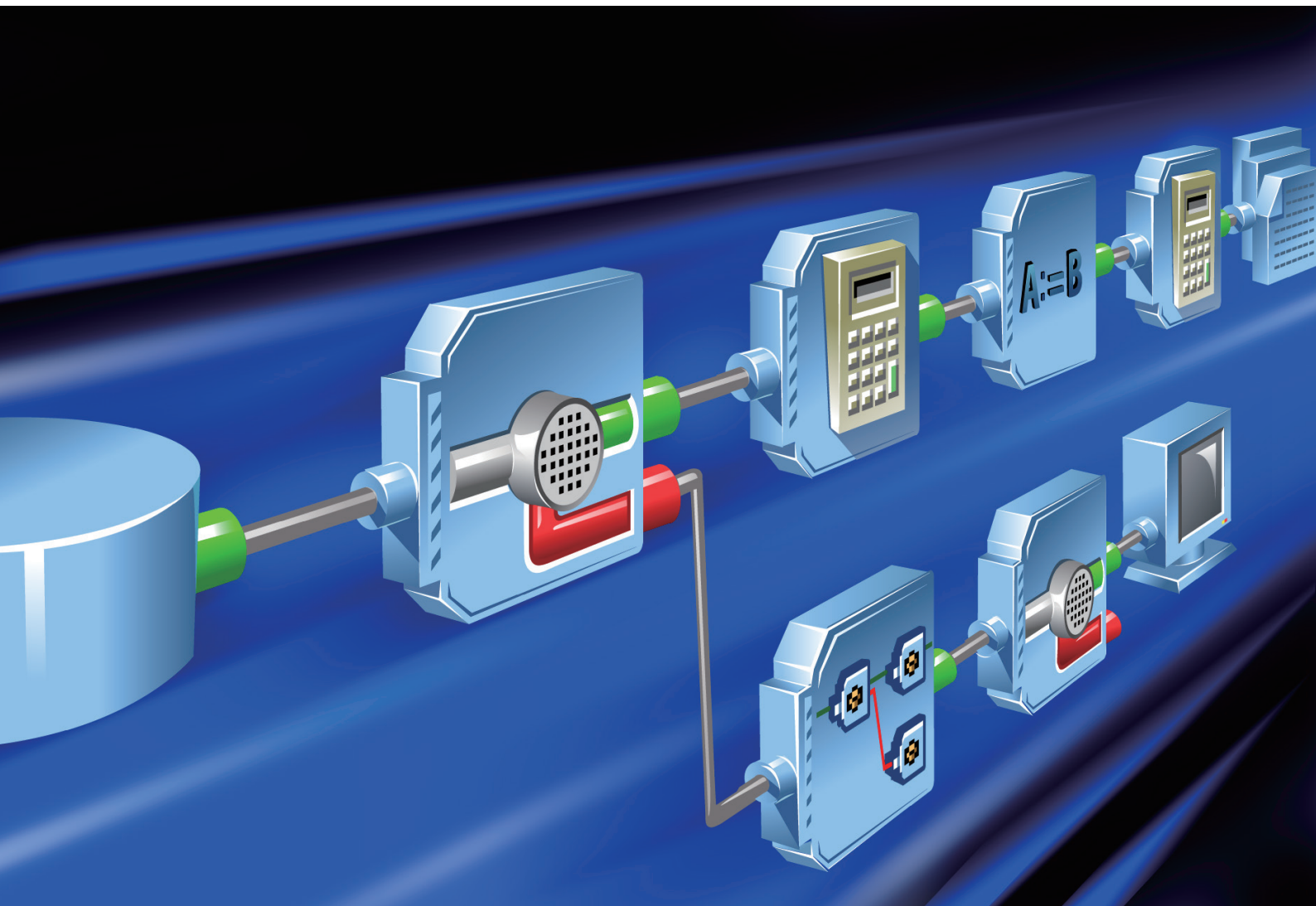


BIOVIA FOUNDATION BIOVIA PIPELINE PILOT

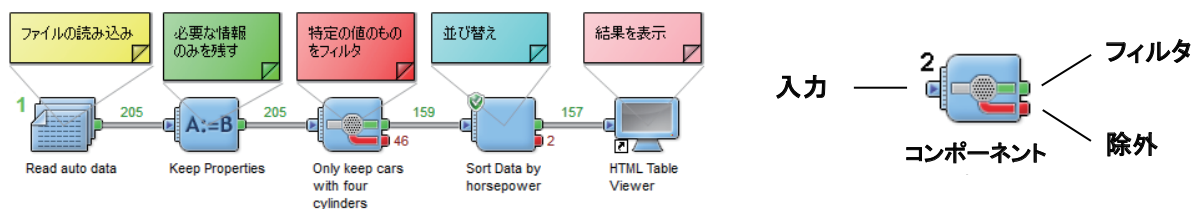
製品カタログ



3000を超えるパーツをつなげるだけで
プログラミングをしなくても
あらゆるデータがつながります

目で見てわかるデータフロー

BIOVIA Pipeline Pilot では、データ処理の一連の流れ（入力/加工/出力）をパイプをつなげて行います。データは行単位で逐一処理されるため、どのデータがどこで処理・除外されたか、ひと目でわかります。大量のデータ（GBオーダー）を簡単に扱えることを目指して設計されており、処理前後のデータの確認、処理途中からの再実行など、最適なデータ処理フローを短時間で構築できます。



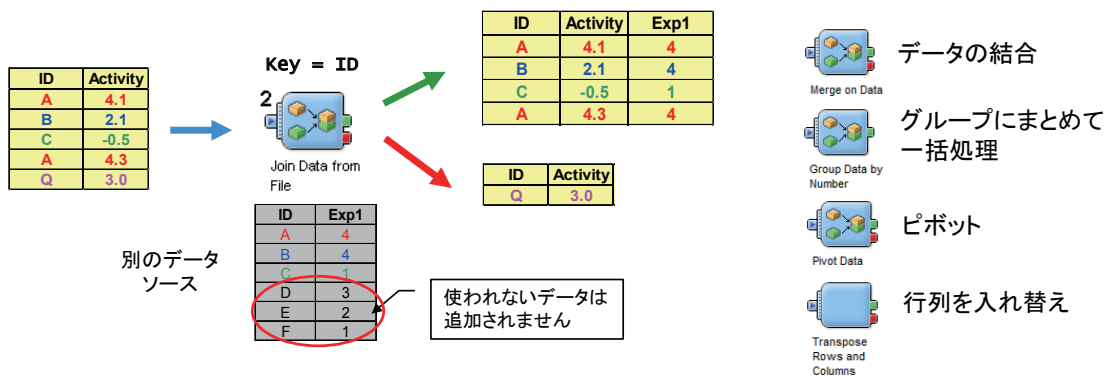
3000を超えるコンポーネント

BIOVIA Pipeline Pilot はファイルやデータベースなど、あらゆるデータソースに接続できます。Excel、Word、PowerPoint など Microsoft Office ドキュメントに加え、ODBC や JDBC に対応しているデータベースにアクセスして、データを取得できます。一度読み込めば、元のフォーマットを気にすることなく、自由にデータの加工ができ、異なるフォーマットへの出力も可能です。



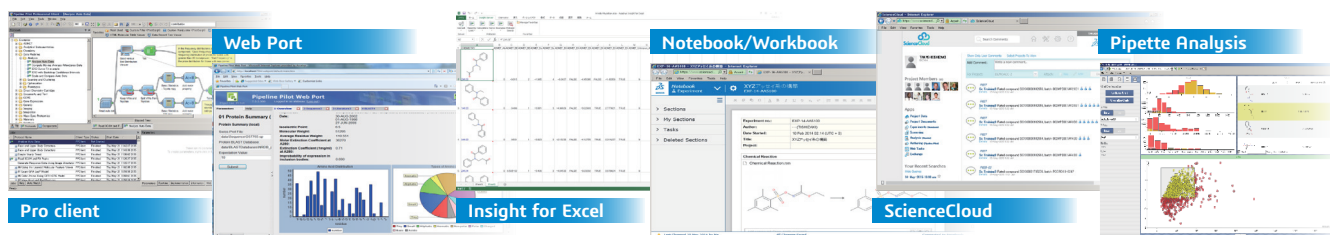
簡単に自由なデータの加工

読み込んだデータは、共通のキー（IDなど）を使いデータの結合や追加データの付加など、最適な形に加工できます。文字列操作などは、PilotScript と呼ばれるデータ単位に特化したスクリプト言語で処理します。



連携可能なアプリケーション

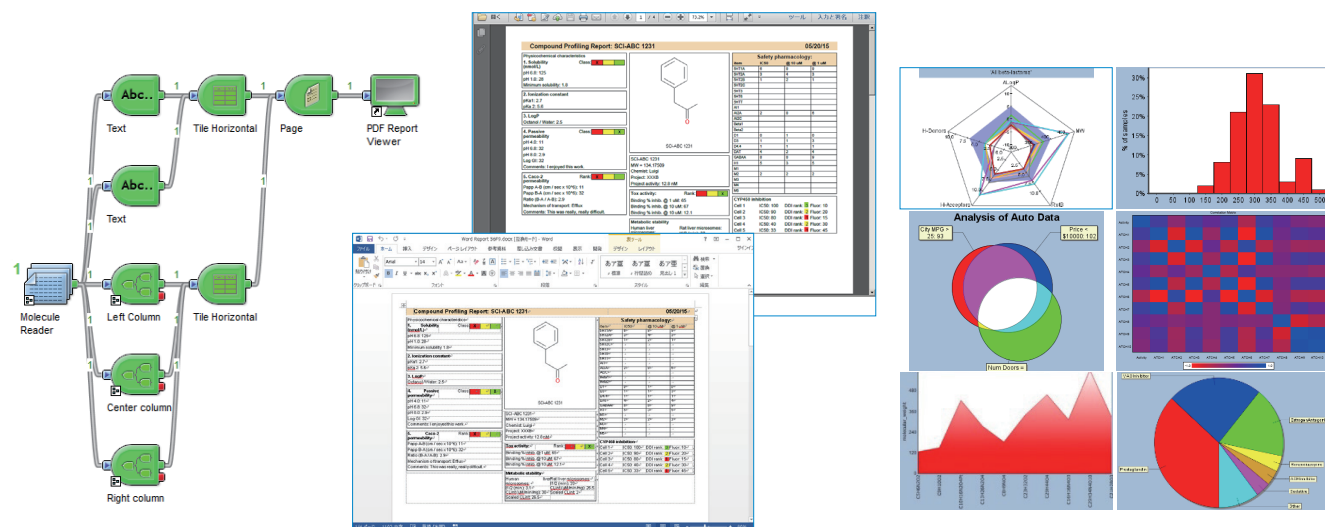
作成したデータ処理フロー（プロトコル）は、BIOVIA Pipeline Pilot Pro Client（Windows版）、Web Port（ブラウザ）と呼ばれる専用のクライアントから実行するだけでなく、BIOVIA が提供する様々なアプリケーションと連携ができます。Javaや.NET SDK、RESTful や SOAP などを使うことで他のアプリケーションから呼び出すことも可能です。また慣れ親しんだ言語環境を使いたい場合には、Perl/Java/.NET/Python/コマンドラインアプリなどをシームレスに組み込みます。



無限の可能性を持つレポートング

画面を作るのに特化したコンポーネントを並べるだけで、Excel、Word、PowerPoint、PDFといった様々なフォーマットでレポート画面を出力できます。

レポートングのコンポーネントは共通要素が多く、出力フォーマットを変えるだけで利用できます。(ただしフォーマット依存の場合は除きます。) また、Webブラウザにも出力でき、HTMLを書かなくても動的なWebページが作成できます。(独自のJavaScriptも組み込めます。)



製薬企業の創薬研究のスタンダード

BIOVIA Pipeline Pilotは過去10年以上、製薬企業の創薬研究の第一線で使われてきました。製品の信頼性も高く、近年では高い信頼性が要求される医薬品製造や開発分野でも使われています。

Molecule	SMILES	EC	ChEMBL_MolSigs	ChEMBL_Activity
	COc1ccc(CO)cc1	1339	10,2289,762624	C1019190
	COc1ccc(CO)cc1	1339	10,2289,762624	C1019190

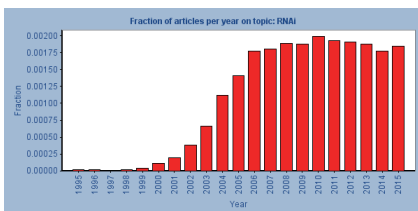
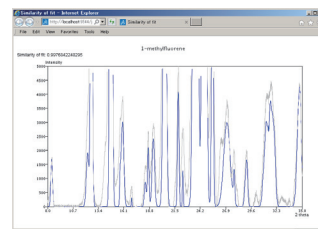
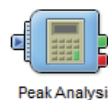


ベイズモデルによる大量データから有用な要素を瞬時に抽出

- 数百万の化学構造式からベイズモデルを作成し、特徴的な部分構造を抽出
- 新しいデータが来ても常に最新モデルが作成できるため、動的に変化するデータから有用な要素を瞬時に抽出 (化学構造式を数値化するFingerprint技術を利用)

測定機器から出力されるデータの自動処理

- マイクロプレートリーダー、LC/MS、NMRなど様々な種類の測定機器から出力されるRawファイルの入力・処理・出力を自動実行可能
- 一度データ処理フローを組んでしまえば、後は定期実行するだけで結果を出力

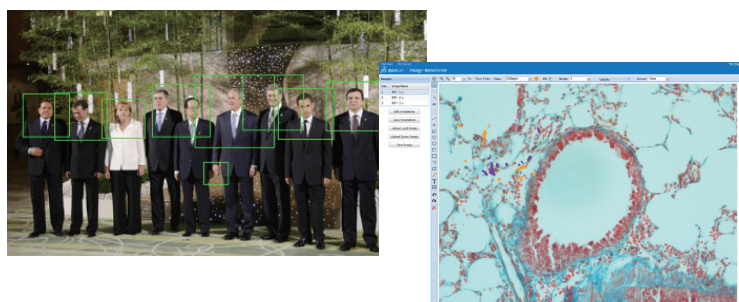


特許や論文、Twitterなどの文字データからのマイニング

- US Patents や PubMed など公共のデータベースにオンラインでアクセスし、論文や特許を収集
- その後、単語やその派生語の出現頻度から年度別の流行や、共起を計算し有用な知見を可視化

画像処理の定形フローをコンポーネント化

- 画像処理に必要な機能をコンポーネント化し、BIOVIA Pipeline Pilot特有のデータ処理フローを活用しながら画像処理を実現



コレクション一覧

▼ コレクション名	▼ 主な機能
BIOVIA Foundation	OracleなどODBC/JDBCで接続可能なSQLデータベース、MongoDB、CSV、XML、Excelなどのファイルからデータの抽出・加工・出力（ETL）やサイエンティフィックな計算エンジンを搭載したサーバ機能を提供。処理フロー（プロトコル）をPipeline Pilotで構築し、Pipeline Pilot、Web Portなどの専用クライアントから実行、もしくはSOAP/RESTといったWebサービス、Java/JavaScript/.NETのAPI、コマンドラインを介して他のアプリケーションからシームレスに実行可能。
BIOVIA Pipeline Pilot	アイコン（コンポーネント）を並べるだけで、視覚的にデータの収集・処理・出力を可能にした、ビジュアルプログラミング・ソフトウェア。研究活動で生じるデータ（数字、文字、化合物、機器データ、配列、NGSなど）を、簡単に収集処理を行い、WebページやPDF、Officeドキュメント（Word、Excel、PowerPoint）でレポート出力。日常の繰り返し作業を自動化することで、大幅な時間短縮を実現。プログラミングが不要なので、IT開発者でなくても様々な処理が構築可能。
Chemistry Collection	ケムインフォマティクス研究や化合物ライブラリ管理の業界スタンダード。部分構造や類似性の検索、Matched Molecular Pairs (MMP) の算出、SARテーブルの作成、ライブラリデザイン、記述子やフィンガープリント (ECFP/FCFP) を使ったフィルタなどを高速に行い、数千万件の化合物セットから目的の化合物の抽出を短時間で処理可能。
ADMET Collection	溶解性をはじめCYP2D6や膜タンパク結合性、30を超す毒性予測の計算モデル(TOPKAT)を含み、創薬段階の候補化合物の最適化や、ベンダーライブラリに含まれる大量の化合物からの有用化合物のスクリーニングに利用。
Gene Expression and Mass Spec for Proteomics Collection	マイクロアレイなどの遺伝子発現データの解析や、LC/MSなどのデータを収集処理し可視化。R BioConductorの機能をコンポーネント化し、大量のマイクロアレイデータの自動処理が可能。大量のスペクトルデータからの特定スキャンの抽出やピークの判定、XCMS、X! Tandemをコンポーネントから実行しペプチドの特定が可能。
Sequence Analysis	塩基配列、アミノ酸配列の解析やアノテーションをするパイオインフォマティクス向けのコンポーネントを提供。各種配列を入出力するためのReader/Writer、表示するためのViewer、ローカルやオンラインでBLASTを実行、EBIやEntrezに接続するためのコンポーネントを実装。
Next Generation Sequencing Collection	Illumina、Ion Torrent、SOLiDなどの次世代シーケンサ（NGS）からのデータを入力し、BWA、Bowtie、Mapreadsなどのアラインメントツールの実行、SNP、コピー数多型、RNA-Seq、ChIP-Seqなど様々な分析がコンポーネントから実行。
BIOVIA Materials Studio Collection	材料系シミュレーションで定評がある Materials Studio の機能を Pipeline Pilot から実行。量子力学計算（CASTEP、DMol ³ 、VAMP）、古典力学計算（Forcite Plus、Amorphous Cell）、結晶多形予測（Polymorph Predictor）などを自動化することで、大量のシミュレーションをワンクリックで実行可能。
Polymer Properties Collection (Synthia)	ポリマーの繰り返し単位、分子量、および温度に基づいて、バルク状非晶質ホモポリマーやランダムコポリマーの物性を推定。J. Bicerano の Prediction of Polymer Properties (Marcel Dekker, NY, 2002 年)に含まれる計算手法に加え、自社データを追加し拡張可能な学習モデルを提供。
Imaging Collection	画像処理のためのコンポーネント一式を提供し、幅広いフォーマット（BMP/JPG/TIFF/RAW/DICOM）に対応した画像の入出力、分析（統計処理、学習モデルなど）が可能。Webベースのインタラクティブなツールをコンポーネント化しており、幅広いユーザ層向けに解析手法を公開・共有。
Data Modeling Collection	データセットにGood/Badのラベルをつけるだけで、文書なら単語、化合物なら部分構造の出現頻度からベイジ学習モデルを構築、新規データを入力すると分類予測が瞬時で可能。他にも部分最小二乗法（PLS）、主成分分析（PCA）、決定木（Recursive Partitioning）、遺伝的アルゴリズムを使った数式最適化（GFA）、クラスターリングを提供。統計ソフトRに特化したコンポーネントも多数搭載。
Documents and Text User Collection	様々なデータソース（ローカル、FTP、HTTP）からのPDF、Word、PowerPointなどドキュメントの収集（Webクローリングも可）、情報の抽出、文書の数値化やパターン検出、トレンドや相関性・分類・クラスターリングが可能。文書からの化合物名の特定を実装し、Chemistry CollectionのName to Structureと組み合わせることで、文書と化合物構造の紐付けも実現。
Thomson Reuters Cortellis Collection	トムソン・ロイターが提供する Cortellis API を利用（別途ライセンスが必要）し、通常のWeb画面から手入力で行っている検索をコンポーネントから自動実行。競合他社情報、低分子やバイオロジクスの特許情報、臨床試験の情報などを定期的に自動取得、更新分データの把握に活用可能。
Lab Analytics Collection	マイクロプレートリーダーからの出力ファイルを読み込み、プレートデータとして統計演算、Dose-Responseの計算、計算結果の表示が可能。粉末X線、NMRなどスペクトルデータを入力し、ピークの判定や面積の計算、波形の類似度からクラスターリングなどを実行。
Mobile Collection	iPhone/iPad向けにApp Storeで提供しているScienceCloud Taskから、Pipeline Pilotのプロトコルをモバイル環境で実行可能。タッチパネルに特化した化学構造描画ツールや、モバイルデバイスならではの音声入力、カメラ、GPS機能を活用したプロトコルを構築可能。HTML5のチャートやレポートを出力。

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com（英語）、www.3ds.com/ja（日本語）をご参照ください。



©2014 Dassault Systemes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEVIA, EXALTER, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および 3DEXPERIENCE はアメリカ合衆国、またはその他の国における、ダッソー・システムズまたはその子会社の商標または登録商標です。ダッソー・システムズは、画面による特許の承認が必要ですが、画面による特許の承認は、画面による特許の承認が必要です。