

PIPELINE PILOT 简介

产品手册



BIOVIA Pipeline Pilot 通过提供科学分析（绿色）功能，并允许手动、重复数据准备和整理任务（蓝色）的自动化和标准化，优化研究创新周期。

科研人员可以将更多的时间和精力放在产品创新上。

BIOVIA Pipeline Pilot 是一个图形化的科学应用软件，它能够优化研究创新过程，提高运营效率，降低研究和 IT 成本。BIOVIA Pipeline Pilot 能够自动化分析数据，使企业的所有用户都能够快速搜索，可视化和报告研究结果。

你可以使用 PIPELINE PILOT：

- 利用现有的研究和知识产权以及自动化数据收集和过程分析，大大加快项目进度（10 倍或更多）
- 在单个环境中快速聚合和处理来自多个不同研究领域的大量结构化和非结构化数据，发现隐藏在数据中的知识

- 实施最佳的解决方案，确保合规性和实现不同组织见的协同合作
- 开发科学的仿真计算模型，降低实验研究成本
- 基于标准化技术和广泛接受的科学知识，快速构建和部署高质量的科学解决方案
- 实时报告可以帮助科研人员改进实验决策，更快地得到理想的实验结果

强大的数据处理能力

Pipeline Pilot 利用强大的数据管道引擎处理 Pipeline Pilot 图形化环境中的数据，这能够促进了科学数据管理、分析和报告的开发、标准化和自动化。

“大量的预定义组件帮我们构建了应用程序，这需要花费数月的时间用传统的编码语言编写。”

— 计算科学家，全球 500 家制药公司

Pipeline Pilot 能够提供:

- 文本、数字和复杂科学数据的数据管理、分析和报告，包括化学结构、生物基因序列和图像。
- 为工程师、开发人员和科学家提供快速应用程序开发环境，该环境使用图形设计界面实现标准软件开发过程。
- 一系列的“科学模块” (>2000) 可以快速创建数据处理所需的各方面组件，包括数据检索、操作、计算分析、过滤和显示。
- “Build-your-own” 组件可以利用标准技术，包括 REST Web 服务、Python、Perl 和 Java
- 经验证的科学组件和涵盖多学科的最佳实践工作流

获取和部署最佳实践

使用 Pipeline Pilot，您可以封装、注释和版本化企业的最佳实践，并以文档的形式记录实现特定结果的相关步骤。您生产的 Pipeline Pilot Protocol 可以共享给其他人，以促进合作开发和知识共享。您还可以通过 Web 接口，包括：Pipeline Pilot Web 端口、SharePoint、自定义客户端和其他方式，将您的自动化过程分享给更广泛的区域。

定制报告和 WEB 应用程序开发

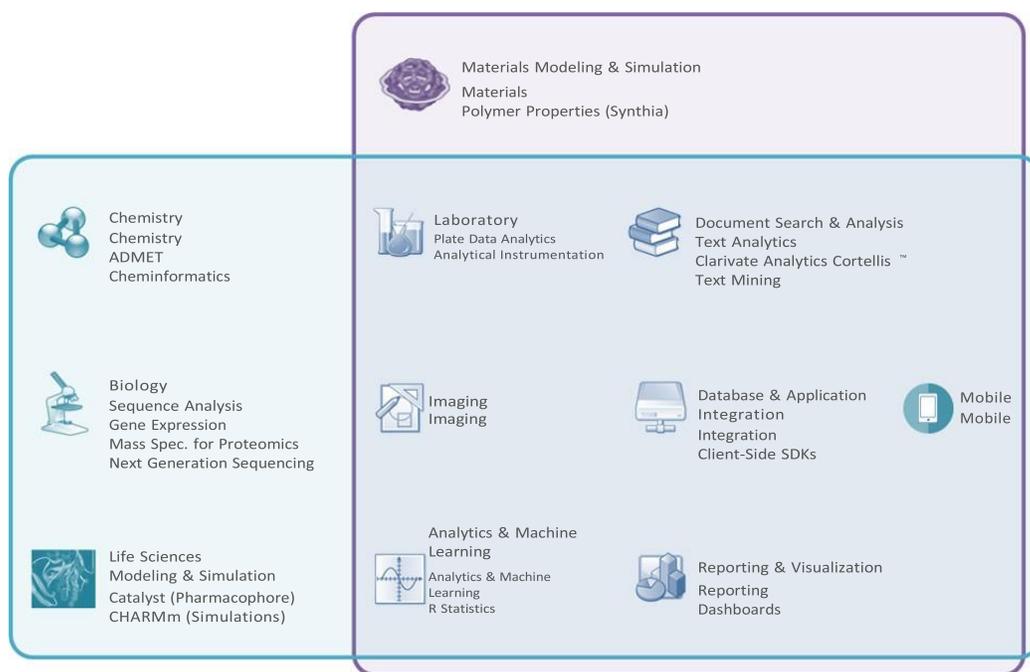
您可以创建自定义的报告，汇总您的数据分析和数据挖掘的 Protocols，并提供各种文本，表格，图表和图像。由于

您可以完全控制布局和内容，因此您可以轻松地解释和传达您的结果。

通过在单个报告中显示多个表格，图表和图像，您可以看到数据的不同视图，包括不同来源的并行比较以及以不同方式处理的数据。您可以采用多种格式部署报告，包括 HTML (5)，PDF，Word，Excel 和 PowerPoint。为了使报告更具动态性，您可以添加交互性，在报告内部，外部之间以及外部进行链接。您可以进一步扩展交互性，以创建将多个 Protocols 链接到一个功能单元中的 Web 应用程序。

BIOVIA 应用能力拓展

Pipeline Pilot 除了是提高个人和工作组工作效率的出色工具，还可以用于扩展和增强其他 BIOVIA 应用程序，包括但不限于 Insight，Excel for Insight，Workbook，Notebook 和 EKB。大多数 BIOVIA 应用程序都具有专门设计的扩展点，通过这些扩展点，Pipeline Pilot Protocols 可以提供计算服务，创建图表或完整报告，用于从文件，数据库和在线资源中加载数据，并与其他应用程序和仪器集成。鉴于管道试验的性质，可能性是无限的！应用程序的最终用户通常不知道他们正在运行 Pipeline Pilot Protocols，这意味着这些最终用户将从 Pipeline Pilot 和组件集合的广泛而深入的功能中受益，同时保持用户界面非常简单—按下按钮或简单的配置表格。



“Pipeline Pilot has made data collection, aggregation, and report preparation incredibly easy by cutting down on processing time as well as time taken to correct human error. In addition, it has also paved the way for standardized report outcomes and helped establish key best practices.”

— Data Analyst, Global 500 Pharmaceuticals Company

客户端

Pipeline Pilot 专业版客户端

Pipeline Pilot Professional 客户端是用于创建数据管道协议的创作工具。客户端用于创建和修改 Procotols 以供个人使用，也可以将其发布以供他人使用。客户端还可用于创建新组件或编辑现有组件，以满足企业和个人的各种需求。

Pipeline Pilot Web 版

Pipeline Pilot Web Port 是基于浏览器的环境，可将 Pipeline Pilot 的功能扩展到广泛的用户社区。Web Port 用户可以访问 Pipeline Pilot Professional 用户创建和运行的 Procotols，从而通过简单的基于 Web 的界面将 Pipeline Pilot 的全部功能公开给广大用户。Web Port 用户可以浏览可用的 Procotols 并对其参数化，以运行自己的数据以满足自己个性化的需求，而不必了解 Protocols 的构建方式。Web Port 的用户还可以通过任何其他基于 Web 的界面（例如 Microsoft SharePoint, RSS feed, Web 链接以及使用任何 Pipeline Pilot 客户端 SDK 开发的自定义界面）访问和执行 Protocols。

PIPELINE PILOT 组件

专业客户端用户可以使用 Pipeline Pilot 组件创建和编辑 Pipeline Pilot Procotols。这些“科学计算分析模块”按科学或功能类别归类为集合。这些集合内包含许多组件，研究人员，开发人员，工程师和 IT 专业人员可以执行科学的和通用的数据处理功能。通过以图形方式组合组件，您可以构建用于数据检索，过滤，分析和报告的工作流。

CHEMISTRY 化学

Chemistry

通过化学智能过滤器和学习功能，可以分析，管理公司数据库中的化学物质。该集合还包括化学试剂盒-高性能数据试剂盒，使您能够在 Oracle 中存储和搜索化学结构和反应。

ADMET

分子集合（例如合成候选物，供应商库和筛选集合）的预测吸收，分布，代谢，排泄和毒性（ADMET）属性。该集合包括人体肠道吸收，水溶性，血脑屏障渗透，血浆蛋白结合，细胞色素 P450 2D6 抑制和肝毒性的模型。

生物

基因表达和质谱分析

基因表达致力于可视化，分析，注释和报告包括单个靶基因在内的基因表达实验。核心功能基于 BioConductor，这是用于分析和理解基因组数据的开源软件。质谱提供了一套全面的组件和示例协议，可创建和自动化定制的蛋白质组学和代谢组学工作流程。

基因序列分析

在可以将模块化工具图形化链接在一起以创建实用的生物信息学例程的环境中，分析，注释和比较生物序列。

高通量测序(NGS)

分析和解释由最新的 DNA 测序仪器生成的大量数据集。NGS Collection 附带了各种各样的 NGS 数据分析管道，它们准备以无与伦比的功能和灵活性来分析您的数据。

数据库 & 应用集成

集成

Integration 是基础 Pipeline Pilot 系统的一部分，可让您使用 Java, Python, REST 将现有的内部程序或第三方程序作为计算服务纳入其中。另外，使用 ODBC 和 JDBC 技术从 Oracle 检索数据进行分析或报告，并将结果直接存储回自己的公司数据库中。

图像

图像处理

成像提供增强，处理，分析，集成，分类，搜索和报告图像数据的功能。它在统一的计算框架中将图像数据与数字，化学，图形和文本数据集成在一起。

分析 & 统计

分析和机器学习

借助这套全面的学习和数据建模工具，针对大型现实数据集进行了优化的统计过滤器和集群组件，可以进行强大的分析和机器学习。访问强大的方法，例如快速数据聚类，贝叶斯学习，主成分分析，线性回归和偏最小二乘回归。集合中提供了用于递归分区（RP），多目标 Pareto 优化和多种 RP 方法的高级建模方法，包括单树和树型学习者林。此外，组件可用于统计方法，以进行数据处理，聚类，学习，经典和探索性数据分析。基础的统计引擎是广泛使用的公共领域 R 统计软件包。

材料建模 & 仿真

Materials Studio

通过 Material Studio 集合, 您可以在 Pipeline Pilot 数据管道环境中访问 Materials Studio 的主要建模功能。它允许访问分析功能, 例如 Reflex 和 Reflex QPA, QSAR Plus 软件包的关键功能以及用于将在 Material Studio 脚本 API 中开发的脚本应用程序集成到 Pipeline Pilot 协议中的实用程序。

聚合物参数 (Synthia)

聚合物参数预测程序提供了一种基于重复单元信息, 分子量和温度快速估算本体, 非晶态均聚物和无规共聚物特性的方法。

报告 & 可视化

报告

作为基础 Pipeline Pilot 系统的一部分, Reporting 提供了一组全面的组件来创建自定义报告, 您可以使用这些报告来显示数据分析和挖掘协议的结果。通过完全控制要包含的内容以及布局的方式, 您可以创建高效的交流工具, 与同事共享知识。

Dashboards

使用 Pipeline Pilot 内置的 HTML5 图表功能, 可以轻松地为任何设备构建现代化的响应式仪表板。

实验室

实验室数据分析

访问读取, 写入, 报告, 可视化, 操纵和执行板数据计算的方法。该集合允许您在数据管道上收集每个数据记录, 并可以从不同维度分析您的数据。该集合还支持访问您在分析实验室中生成的数据, 例如, 常用数据处理操作, 例如峰识别, 峰积分, 线宽分析背景检测和去除, 内插, 截断, 谱图缩放和平滑, 谱图减法, 傅里叶变换以及 NMR 特定功能。

文档搜索 & 分析

文档 & 文本

通过文档和在线资源搜索, 表征和分析, 可以使用新信息来增强处理例程, 并且用户可以对公共文档和内部文档进行化学智能的文本挖掘。编辑现有文档的高级功能可实现手动文档编辑与自动分析以及内容插入之间的高效集成。

Clarivate Analytics

借助 Clarivate Analytics Cortellis™ 集合, 您可以通过直接从 Pipeline Pilot Protocols 的 Cortellis 数据库访问广泛的生命科学信息, 并将其与您的内部数据相互集成, 从而简化与“数据泛滥”保持一致的过程。Cortellis 系列是 BIOVIA 与 Clarivate Analytics 之间持续合作关系的一部分, 可访问 Cortellis 数据库, 包括药物靶标, 化合物, 公司, 临床试验和结果以及专利等。

移动端访问

移动端

Pipeline Pilot Mobile 集合旨在提供对数据和信息的即时访问。通过使用 ScienceCloud Tasks 应用程序, 最终用户可以直接从其 iPad 或 iPhone 访问功能强大但易于使用的 Pipeline Pilot Protocols。您可以将现有的 Pipeline Pilot Protocols 作为“任务”部署到应用程序中, 通常无需更改 Protocols。此外, Mobile 集合提供了丰富的输入文本格式 (例如, 音频, GPS 位置, 摄像头), 可以充分利用 iOS 设备的支持触摸的环境。您还可以将 Mobile 集合用于针对移动设备进行优化 (基于 HTML5) 的图表, 以提供复杂的最终用户体验。

了解更多 Pipeline Pilot, 请访问 accelrys.com/pipeline-pilot

我们的 3DEXPERIENCE® 平台能为各品牌应用注入强大动力, 服务于 11 个行业, 并提供丰富多样的行业解决方案体验。

作为一家为全球客户提供 3DEXPERIENCE 解决方案的行业领导者, 达索系统致力于为企业和客户 提供虚拟空间, 助力打造可持续创新。其全球领先的解决方案改变了产品在设计、生产和技术支持上的方式。达索系统的协作解决方案更是推动了社会创新, 扩大了通过虚拟世界来改进真实世界的可能性。达索系统为 140 多个国家超过 17 万个不同行业、不同规模的客户带来价值。如欲了解更多信息, 敬请访问: www.3ds.com。



 **DASSAULT SYSTEMES** | The 3DEXPERIENCE® Company

 **ACQTEC**
研索仪器

研索仪器科技 (上海) 有限公司

上海市盈港东路7799号虹桥宝龙中心A座2101A室

<http://www.3dsbiovia.com.cn>

info@acqtec.com

+86 (21) 3412 6269

400-050-5810

