

CHEMINFORMATICS COLLECTION

データシート

Cheminformatics Collectionは、BIOVIA Pipeline Pilotで簡単にデータベース検索・参照アプリケーションを構築できるように設計されています。このコレクションには、データベース検索とヒットリスト管理機能を提供するDatabase Searchと、化学構造データをOracleデータベースで保存・検索する高性能データカートリッジであるBIOVIA Directの2つのシステムで構成されています。これらの強力なシステムによってBIOVIA Pipeline Pilotの機能は拡張され、さまざまな社内のケムインフォマティクス・アプリケーションを構築するための強固な土台を提供します。

CHEMINFORMATICS COLLECTION

によって、次のことを実現できます。

- Webブラウザベースのクライアント、または Web Port アプリケーションから多様なデータソースを検索できます。
- Database Searchを使って、データベース設計の変更やデータ移行作業なしに、新規や既存のデータソースを統合し検索できます。
- BIOVIA Pipeline Pilot Database SearchというWebクライアントを使って、合成研究者やアッセイ担当者が簡単に使って、自由に変更できるフォームを使ったインターフェースを提供します。またデータの検索、整理、解析、レポート作成、化学構造や反応のインデックス付け、検索など、ワンストップのインターフェースを提供します。
- BIOVIA Direct とコンポーネントを使って開発作業を簡素化・高速化し、BIOVIA Pipeline Pilot ベースの高性能な検索・参照アプリケーションを構築できます。

フレキシブルな検索とデータ取得

利用するデータが多くなったり、新規システムが導入されたりすると、データベース・システムの数が増え、複数のシステム間でデータを利用や管理が難しくなります。Database Searchはこのような問題の解決を目的として作られており、WebクライアントやBIOVIA Pipeline Pilot Web Portアプリケーションから、多種多様なデータソースへの検索を可能にします。Databases Searchは、各データソースのメタデータをマッピングすることによって、データベースの移行や変更を行わずに検索を可能にします。ユーザーは、BIOVIA Pipeline Pilot Database Search Webクライアント、BIOVIA Pipeline Pilot Web Port、BIOVIA Pipeline Pilot Clientプロトコルから、共通のクエリを使って異なるデータソースを検索できます。

すぐに使用できるWEBクライアントとコンポーネント コレクション

BIOVIA Pipeline Pilot Database Search Webクライアントは、Webブラウザでドラッグ・アンド・ドロップできるフォームを作成するWebベースのインターフェースです。このクライアントは導入と利用が簡単で、各端末でのインストールは不要です。これを使って、データ検索や結果リストを見るフォームを設計できます。BIOVIA Pipeline Pilotとの統合により、このクライアントから直接 BIOVIA Pipeline Pilotのプロトコルを実行し、検索結果をドリルダウンして解析するレポートを作成できます。結果リストのインタラクティブな解析とレポート作成は、Cheminformatics Collection によってサポートされ、さまざまなリスト・リーダーや検索コンポーネントを提供し、BIOVIA Pipeline Pilot内で結果リストのフィルタ、処理、操作を行うプロトコルや、Database Searchシステムにマッピングされているデータソースの検索を行うプロトコルを開発者が簡単に作成できるように支援します。

高性能なCHEMISTRY CARTRIDGE

BIOVIA Directは化学構造や化学反応を直接Oracleデータベースに保存し、インデックスを付け、検索を実現する、高性能データカートリッジです。このカートリッジでは部分構造、完全一致、類似性による検索をサポートしており、一般的な化学形式も多数サポートしています。

Windowsまたは64ビットLinux上のOracle11gへの展開を想定して最適化されているBIOVIA Directでは、超高速での検索とインデックス付けが可能であり、1億を超える分子を含むデータセットを処理するところまで規模を拡大できることが実証されています。

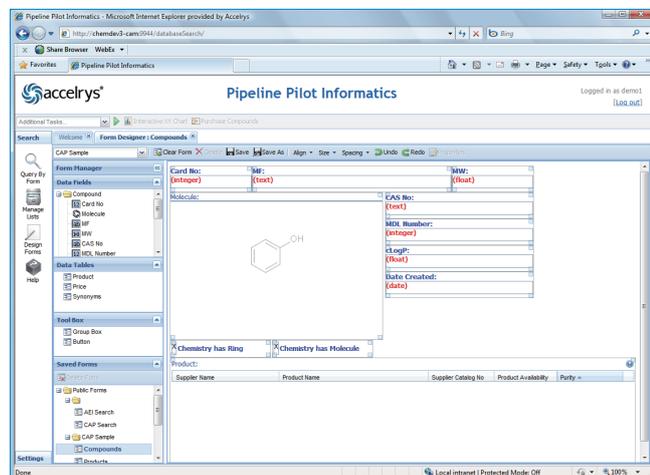


図1: クエリフォームをBIOVIA Pipeline Pilot Database Search Webクライアントで作成

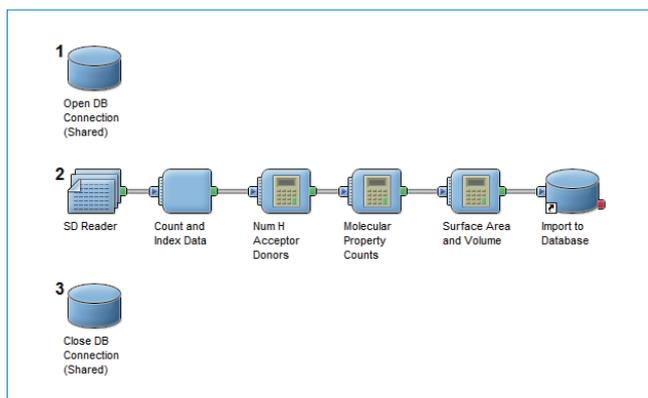


図2: Create Direct Databaseコンポーネントを使用して、インデックスを持つ検索可能な化学構造を含んだテーブルをOracleに作成するプロトコル

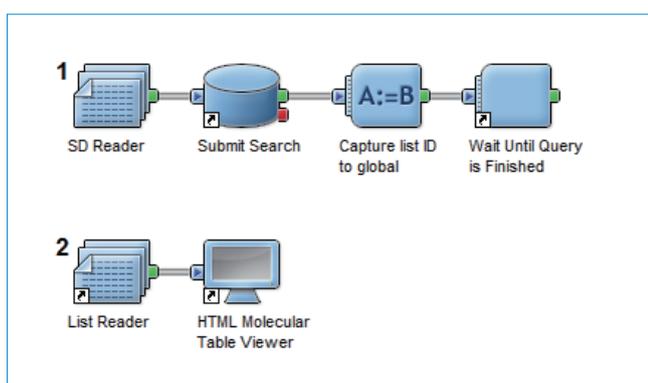


図3: 試薬データベースに対する部分構造検索で使用するため、SDファイルから構造をインポートするプロトコル。この例では、検索結果が新しいリストに保存され、HTML形式の表に表示されます。

ORACLEで化学データベースを構築するための機能豊富なツールセット

BIOVIA Direct の機能には Oracle API から直接アクセスでき、SQLやPL/SQLを使用して直接検索やインデックス付け操作を行えます。BIOVIA Pipeline Pilotベースの開発向けに、BIOVIA Directには豊富なコンポーネントコレクションが用意されています。ここに含まれるコンポーネントやプロトコルを使えば、Oracleデータベースの専門的な管理やOracleコマンドラインの文法に精通していなくても、プロトコルを作成することによって化学データの挿入、インデックス付

け、検索を簡単に行えます。また、カートリッジのインデックスの状態をわかりやすいダッシュボードやレポートで視覚的に監視するプロトコルも提供されています。これにより、データベースの可用性を確認し、ダウンタイムの発生を防ぎ、ユーザーによる化学データの検索/登録操作の中断が極力少なくなるように対策を取ることもできます。

アプリケーションを迅速に作成

Cheminformatics Collectionでは、データベースの検索/参照を行うアプリケーションをBIOVIA Pipeline Pilotで簡単に作成できる包括的なツールセットを提供しています。BIOVIA Pipeline Pilot の機能を拡張する Database Search および BIOVIA Direct 用のコンポーネントコレクションを使用すると、結果リストの処理やOracleへの化学データの保存を行うプロトコルを作成できます。また、そのまますぐに使用できるBIOVIA Pipeline Pilot Database Search Webクライアントのインターフェースは、使いやすいだけでなく、プロトコルベースのツールを組み込むことによって拡張することが可能です。研究者が多様なデータソースのデータを検索、解析して、レポートを作成できるようにすることによって、生産性を高め、より適切な意思決定を行えるよう支援します。

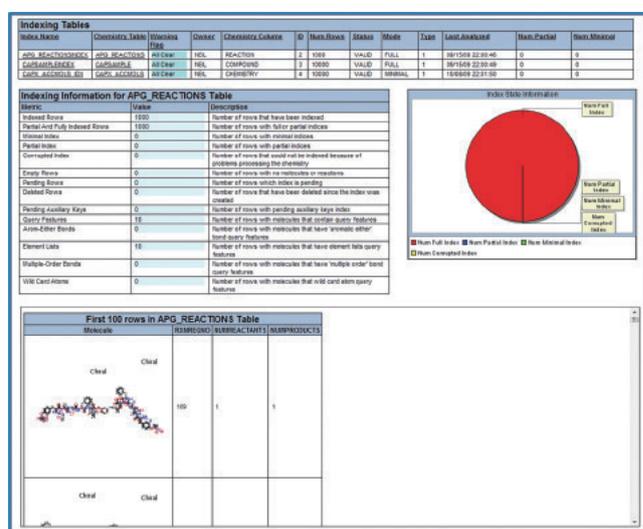


図 4: インタラクティブなダッシュボードを使用してカートリッジのインデックスの状態を表示

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。

