

BIOVIA DIRECT

データシート

BIOVIA Direct 化学データカートリッジを使用すると、完全に統合されたOracle®環境で研究者が分子や反応の登録、検索、取得を行うことが可能になります。業界で高く評価されているBIOVIAの化学研究用機能とFastsearchインデックスを組み合わせることで、構造と反応の検索や登録において最高のパフォーマンスと拡張性を実現できます。

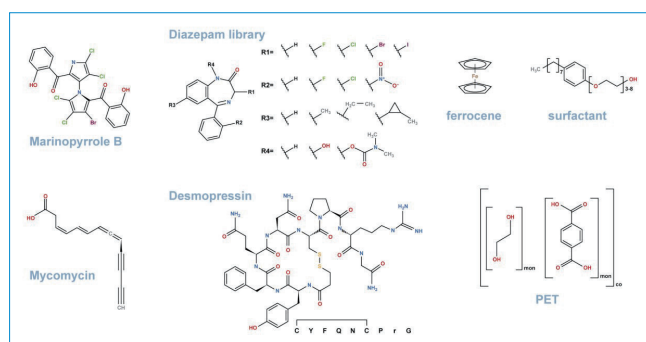


図 1: BIOVIA Directでサポートされている多数の化学表現の例

高度な化学情報検索

- マルクーシュ（汎用）構造の登録と検索
- 2Dおよび3Dの完全一致検索と部分構造検索
- 完全一致検索、互変異性体検索、異性体検索、塩検索用のFlexmatch検索
- より小さい/より大きい化合物の検索を含む、類似性検索
- 分子量、化学式、R-グループ、S-グループ、ポリマー、混合物の検索
- 反応の部分構造検索および類似性検索
- より正確なヒットを実現する高度なクエリーオプション設定
- 構造と検索に使用する高度な立体化学
- アレンとビフェニルに対する非四面体立体化学のサポート
- 化学的に修飾された生体高分子の格納と検索 - 抗体-薬物複合体、ペプチド、オリゴヌクレオチド、オリゴ糖など

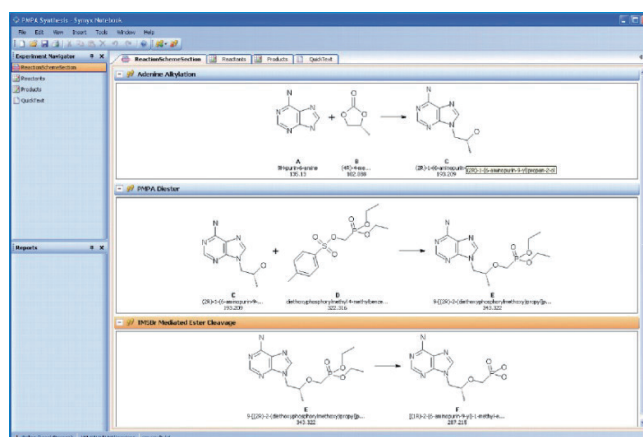


図 2: BIOVIA Directは、複合型電子実験ノートBIOVIA Enterprise Lab Notebookをサポートしています。

業界標準フォーマットのサポート

- SDfile、RDfile
- Canonical SMILES文字列
- Chimestring、molfile、rxnfile
- InChI名とキー
- アメリカ電機工業会 (NEMA) 規格のキー
- モノアイソトピック質量
- 同位体標識構造の質量
- UniProtフォーマット
- 分子と反応の両方に対応する単一のカートリッジ
- 大容量データベースで真価を発揮する、反応および分子用のFastsearchインデックス
- ノンストップの可用性
- 1,700万件以上の反応と1億件以上の構造を格納したデータベースでテストを行い、検証済み

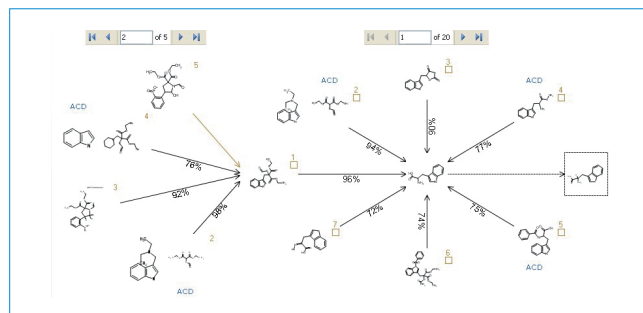


図 3: BIOVIA Direct の優れたパフォーマンスにより反応の計画を瞬時に立てられ、各構造の在庫情報も提示されます。

ORACLEテクノロジーへの取り組み

BIOVIA Directでは、標準的なOracleのSQL構文を使用して研究者や開発者が化学データベースに直接アクセスできます。このテクノロジーにより、分子構造や反応を格納したリレーショナルデータベースを完全に管理できるだけでなく、他の社内データをオープンで柔軟性に富むOracle環境で統合できます。Oracleテクノロジーの利点の例として、テーブルに複数のドメインインデックスを設定できる点が挙げられます。システムは特定の制限値に拘束されることなく、必要なだけの分子/反応列を持つ複数の分子/反応テーブルをサポートします。

簡単なデータ統合

オープンな統合により、開発者はOracleやMicrosoftなどが提供する標準的なリレーショナル データベース開発ツールを使用できます。また、ActiveX® Data Objects(ADO)、Open Database Connectivity (ODBC)、Java® Database Connectivity (JDBC)、SQL*Net®といった業界標準のデータベース接続ツールを使用して、反応や化学構造の検索を行えます。

柔軟なアプリケーション開発

BIOVIA Directは、BIOVIA Pipeline Pilot™、Java®、Visual Basic®、.NET®、C++といった業界標準の開発環境を使用して、構造や化学反応を管理するケムインフォマティクス アプリケーションを強力に支援します。データモデルが独立しているため、このカートリッジはアプリケーション設計や独自の反応/分子情報の管理に、非常に柔軟に対応できます。

ISISからBIOVIA DIRECTへの移行

BIOVIA DirectはISISシステムとの互換性があります。従来のISIS分子データベースを使用している研究開発組織では、ISISからBIOVIA Directへの段階的アップグレードの一環として、データベースをBIOVIA Directにアップグレードし、既存の ISIS/Hostアプリケーションからそのデータベースにアクセスすることができます。BIOVIA Directは、ISISユーザーにもBIOVIAの優れた化学表示、立体化学、化学データのFastsearch機能を提供します。

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。



3DEXPERIENCE®

©2014 Dassault Systemes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, SIMULIA, SIMULIA, GEOVIA, EXALTED, 3D VIA, 3DSWIM, BIOVIA, および INETVIBES 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登録商標または商標です。ダッソー・システムズまたはその子会社の商標を使用する際には、書面による許可の承認が必要です。

 DASSAULT SYSTEMES | The 3DEXPERIENCE® Company



▶ Challenging Tomorrow's Changes

伊藤忠テクノソリューションズ株式会社

流通・エンタープライズ事業グループ
ライフサイエンス事業部

141-8522
東京都品川区大崎1-2-2 アー
トビレッジ大崎セントラル
タワー

TEL: 03-6417-6600
E-mail: ls-marcom@ctc-g.co.jp