

# BIOVIA PIPELINE PILOT CHEMISTRY

データシート

BIOVIA Pipeline Pilot Chemistryは、分子のプロパティの計算、フィルタリング、解析等、化学構造式に関連する処理を行うのに最適で包括的なスイートを提供します。このコレクションは、BIOVIA Pipeline Pilotの標準機能に、化合物情報処理やケムインフォマティクス解析などの機能を追加するコレクション群になります。この拡張機能を使用すると、以下のような化学構造式に関連した幅広い分野のプロトコルを作成することができます。

## BIOVIA PIPELINE PILOT CHEMISTRYを使用すると、次のことを実現できます。

化合物ライブラリの収集：

- ライブラリのクリーンアップと標準化
- 複数ライブラリの比較
- 部分構造と類似構造の検索
- 幅広い特性プロファイリングとサブセットの選択

コンビケムライブラリの設計：

- 骨格および反応に基づく列挙

Modeling Collectionとの組み合わせによって以下の事が実現：

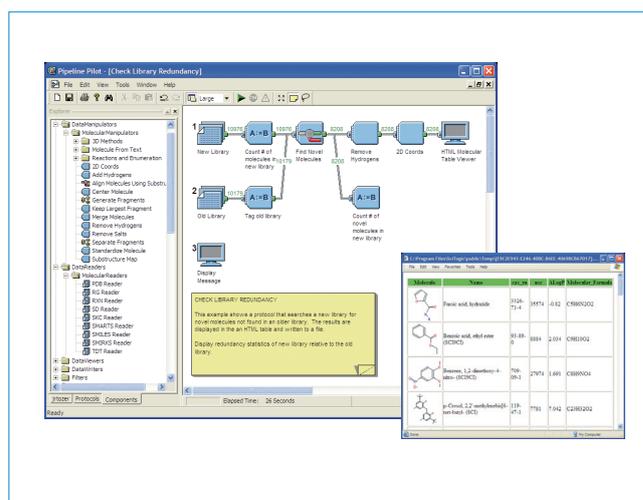
- 構造活性モデルの作成
- 化合物のクラスタリング
- MCS(Maximal common substructure)の抽出

## READERS AND WRITERS

BIOVIA Pipeline Pilot Chemistryには、多くの化学ファイルフォーマットに対応したリーダー/ライター機能が搭載されています。SD、RG、RXN、SMILES、SMIRKS、SMARTS、TDT、MOL2、およびPDBなどの形式です。ISIS™、MDL Direct、ActivityBase、Accordなどのデータベースから構造データを読み込むこともできます。

## VIEWERS

BIOVIA Pipeline Pilot Chemistryでは、BIOVIA Pipeline Pilotの標準ビューアに加えて、BIOVIA Discovery Studio VisualizerやISIS for Excelなどのビューアともシームレスに統合することができます。さらに、分子データをグラフ表示できる、さまざまなWebビューアが利用できます。



## MANIPULATORS

BIOVIA Pipeline Pilot Chemistryは、塩、Tautomers、立体化学、電荷に基づいて構造を修正するマニピュレータを備えています。このため、一連の分子を正規化してから、分子の比較、化学反応の適用、化合物ライブラリのマージ、およびコンビケムエミュレーションを行うことができます。構造をアライメントするマニピュレータと、高速で高品質な2Dおよび3Dレイアウト用のマニピュレータを使用できます。

## FILTERS

化合物のプロパティ構造または計算結果に基づいてフィルタをかけるコンポーネントが提供されています。これらのフィルタは、簡単な特性値の閾値 (Lipinski Filter の閾値など) から、より高度な部分構造検索や重複チェック等のフィルタを行うことが可能です。ダイバーシティまたは類似性に基づくサブセットの抽出にもフィルタを使用できます。個別に必要なフィルタを作成する事もできます。

## PROPERTY CALCULATORS

BIOVIA Pipeline Pilot Chemistryでは、さまざまな分子特性計算を高速で行うことができます。1秒あたり数百、数千の分子を解析できます。分子特性は、AlogP、logD、pKaと溶解度、分子量などがあります。他にも、トポロジー インデックス、さまざまな分子特性数などがあります。

## STRUCTURAL FINGERPRINTS

構造上のフィンガープリントを計算する BIOVIA Pipeline Pilot 独自の手法がBIOVIA Pipeline Pilot Chemistryに含まれています。この方式はExtended Connectivity Fingerprints (ECFP) 法として知られています。最大40億のさまざまな構

造的特徴を利用して分子の各原子の環境にインデックスを付けることができます。検索、クラスタリング、およびモデリングの適用分野に有効な、非常に高速な手法です。ECFP法は、別コレクションである Modeling Collection の Bayesian 学習法と併せて使用すると、大規模データセットに対する説予測を構築できます。

## MOLECULAR TOOLKIT

Molecular Toolkit の Java および Perl API を Integration Collection と組み合わせて使用すると、分子データモデルの検索をプログラムから利用できます。

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](http://www.3ds.com)（英語）、[www.3ds.com/ja](http://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, GEOVIA, EXALAND, 3D VIRA, 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

**CTC**

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