

3DEXPERIENCE®

BIOVIA 総合カタログ

BIOVIA 製品リスト

カテゴリ	製品		製品 / ソリューション説明
分子モデリング・シミュレーション	Materials Studio	Materials Studio Visulaizer	構造モデルの作成、シミュレーションの設定と実行、計算結果の解析のための統合ユーザーインターフェース
		Materials Studio 量子力学シミュレーション DMol3, CASTEP, ONETEP, DFTB+, FlexTS	密度汎関数理論 (DFT) に基づく第一原理計算による分子、結晶、表面など物性シミュレーションツール
		Materials Studio 古典力学シミュレーション Forcite, GULP, COMPASS	有機、無機、複合材料などの古典力学シミュレーション。有機系の高精度計算が可能な力場を搭載
		Materials Studio メソスケールシミュレーション Mesocite, MesoDyn	低分子やポリマーの混合物などの複雑系のメソスケールでの粗視化分子動力学および DPD シミュレーション
		Materials Studio 化学反応解析 Cantera, Kinetix	様々な反応器モデルでの化学反応速度論に基づく反応解析や、二次元表面の動的モンテカルロ法による反応解析
		Materials Studio 結晶解析 Morphology, Polymorph, Reflex	結晶材料の粉末 X 線構造解析、結晶形態、多形の予測ツール。結晶の形態を結晶の原子構造から予測
	Solvation Chemistry	Solvation Chemistry COSMOtherm, COSMObase, TURBOMOLE	COSMO-RS 法に基づく液体の熱力学特性予測ツール。混合溶媒中での溶質の溶解度スクリーニングなどが可能
データサイエンス	Pipeline Pilot	Pipeline Pilot Server	データの収集・解析・レポートを行うための研究開発向けローコード・インフォマティクスプラットフォーム
		Pipeline Pilot Professional User	ローコード・ノーコードでインフォマティクスを実施するための開発・実行用ユーザーインターフェース
		Pipeline Pilot Web User	Pipeline Pilot で作られたデータ解析処理をブラウザから実行するユーザーインターフェース
		Pipeline Pilot Component Collection, Chemistry, Analytics and Machine Learning	ローコード用部品コレクション。ケムインフォマティクス、データモデリングなど
		Pipeline Pilot Component Collection, Imaging, Documents and Text, Lab Analytics	ローコード用部品コレクション。画像解析、テキスト解析、スペクトル解析など
		Pipeline Pilot Component Collection, Polymer Properties	ローコード用部品コレクション。ポリマーの物性予測
インフォマティクス		Draw	BIOVIA 製品標準の化学構造、反応式を描画・入力するための化学構造式描画ツール
		Insight	データベースを横断的に検索・参照・可視化するための統合検索、データ解析ソリューション
		Insight for Excel	Microsoft Excel 用のアドイン。Excel で化学構造の取扱い、デスクリプタの計算などが可能
		Direct	Oracle Data Cartridge を利用した SQL 文による化学構造、反応式登録検索用データベースエンジン
		Registration	化学構造式・バイオリジクスなどのエンティティ登録・管理システム
ラボソリューション	電子実験ノート	Notebook	幅広い業務に対応可能で非常に使いやすく、また導入も簡単で低コストな電子実験ノート
	One Lab	Compose	SOP、手順書を電子的に作成・レビュー・管理するアプリケーション
		Capture	BIOVIA Compose で作成した電子 SOP をもとに、実施記録を行うアプリケーション
		Task Plan	ラボの試験依頼、タスク管理、進捗管理を担うアプリケーション
		Samples	サンプルに対する小分け、移動、取得、廃棄などの記録を残すことができるアプリケーション
		Equipment	分析機器・各種装置から BIOVIA Capture へのデータ取り込みを行うモジュール
		CISPro	試薬の在庫、残量管理、ハザードや法規制情報の表示ができる試薬管理アプリケーション
サイエンス・クラウド	ScienceCloud	ScienceCloud Notebook User	ScienceCloud のサービスとして Notebook を提供
		ScienceCloud Authoring User	ScienceCloud のサービスとして Pipeline Pilot を提供
		ScienceCloud CISPro User	ScienceCloud のサービスとして CISPro を提供
		ScienceCloud Project Data User	ScienceCloud で、化学構造式、物性評価データ、関連データを管理するための機能
3DEXPERIENCE アプリケーション /Cloud		Research Scientist	電子実験ノートを使った研究情報の記録・管理、さらに試薬や原料の管理、化合物の登録等が可能
		Formulation Designer	配合設計に必要な計算、物質・原材料情報管理、法規制チェックなど統合配合情報管理ソリューション
		Materials Modeler	3DEXPERIENCE Platform (cloud) 版 Materials Studio

ダッソー・システムズは3DEXPERIENCEカンパニーとして、人々の進歩を促す役割を担います。弊社は持続可能なイノベーションの実現に向けて、企業や人々が利用する3Dのバーチャルコラボレーション環境を提供しています。

ダッソー・システムズは3DEXPERIENCEカンパニーとして、人々の進歩を促す役割を担います。弊社は持続可能なイノベーションの実現に向けて、企業や人々が利用する3Dのバーチャルコラボレーション環境を提供しています。弊社のお客様は、患者、市民あるいは消費者のために世界の持続可能性を高めるべく、3DEXPERIENCEプラットフォームとアプリケーションを使って現実世界のバーチャルツイン・エクスペリエンスを生み出し、さらなるイノベーション、学び、生産活動を追求しています。ダッソー・システムズ・グループは140か国以上、あらゆる規模、業種の30万社以上のお客様に価値を提供します。

より詳細な情報はホームページ、<https://www.3ds.com/ja> (日本語) 、<https://www.3ds.com> (英語) をご参照ください。



3DEXPERIENCE®



ヨーロッパ/中東/アフリカ

Dassault Systèmes
10, rue Marcel Dassault
CS 40501
78946 Vélizy-Villacoublay
Cedex France

アジアパシフィック

ダッソー・システムズ株式会社
〒141-6020
東京都品川区大崎 2-1-1
ThinkPark Tower

南北アメリカ

Dassault Systèmes
175 Wyman Street
Waltham, Massachusetts
02451-1223
USA

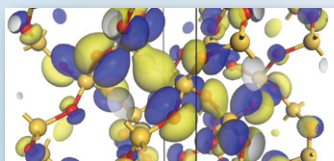


化学構造式、画像、スペクトル、文書など、研究開発で生じるあらゆるデータを活用するためのデータサイエンス、インフォマティクス環境。コンポーネントと呼ばれるアイコンを自由に組み合わせ、化学構造式や画像を数値化し特徴量を抽出、データモデリング、機械学習モデルの作成や、データ解析・データマイニング、視覚化、レポートなどをローコード、ノーコードで実行できます。

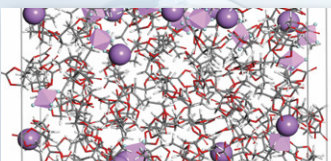
- マテリアルズ・インフォマティクス統合環境
- 研究開発用ローコード・ノーコード、データ解析ツール
- データの収集、クレンジングと加工、機械学習モデル作成、可視化
- 全社的なサイエンスツールの展開
- Pythonなど外部ツール、データベースとの接続、NotebookやMaterials StudioなどBIOVIAツールとの連携

低分子（化学品、医薬品）、高分子（プラスチック、ゴム）、金属（炭素鋼、非鉄合金）、無機材料（半導体、セラミックス、ガラス）、複合材料（繊維強化材料）など、あらゆる分野の高機能性材料の研究開発を行うための総合的な分子モデリング/シミュレーション環境。実験だけでは捉えきれない原子・分子レベルでの材料の現象解明を行い、材料開発の効率化を支援。

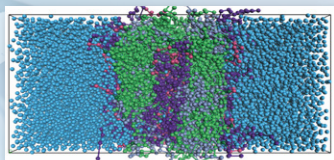
- 材料の様々な状態（分子、結晶、アモルファス、表面、界面）を思い通りにモデル化
- 様々な材料特性（構造、機械、電気、熱、輸送、分光特性など）の予測
- 量子力学、古典分子動力学、粗視化シミュレーションまでをカバー
- 結晶解析（結晶多形、結晶形態、粉末X線回折）や反応解析（反応速度論、動的モンテカルロ法）
- 多機能で洗練された使いやすいユーザーインターフェース
- Pipeline Pilotとの連携による高度な計算の自動化（機械学習のためのデータ収集、ハイスループットスクリーニング）



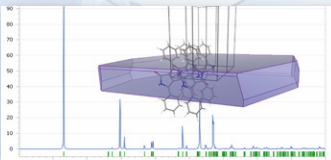
量子力学計算
CASTEP, DMol3, DFTB+



古典分子動力学計算
Forcite, GULP, COMPASS



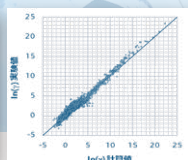
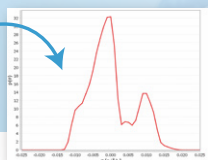
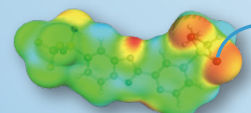
粗視化シミュレーション
Mesocite, MesoDyn



結晶解析ツール
Polymorph, Morphology
Reflex Plus

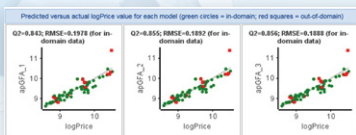
幅広い産業（高分子・石油化学、塗料、肥料・農薬、香料、食品・飲料、製薬）で重要となる溶液中での分子の平衡状態の熱力学的特性を予測。COSMO-RS法に基づき高精度かつ高速に予測が可能。

- 溶液中での配座予測およびCOSMO表面の計算機能
- 化学ポテンシャルから、液相、気相、固相の物性予測
 - 液相：溶解度、pKa、活量係数、液液平衡など
 - 気相：溶媒和自由エネルギー、蒸気圧、ヘンリー定数、溶解度、気液平衡など
 - 固相：溶解度、共結晶スクリーニング、固液平衡など
- 液相および気相での異なる配座を含む13,000以上の化合物のCOSMO表面のデータベース
- 大きな分子をフラグメント化することでCOSMO表面の計算を省略可

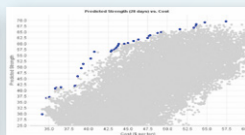


	R1	R2	R3	R4	R5
Z ⁺	-7.823	-2.892	-1.892	1.209	-3.008
Z ⁻	-7.895	-1.147	-1.896	1.244	-1.917
Z ⁰	-20.896	-14.910	-12.342	-12.17	-13.211

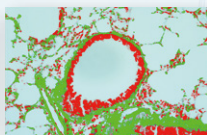
化学構造解析・ケムインフォマティクス



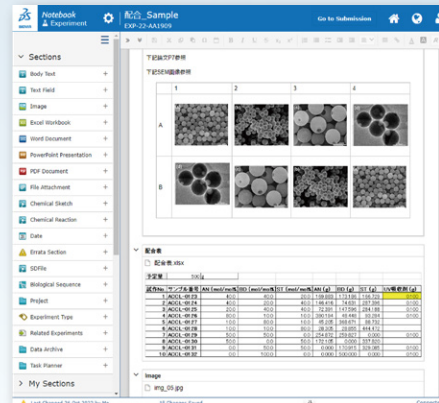
機械学習モデルの作成と検証



バレットソートによる配合最適化



画像解析と数値化



電子実験ノート: Notebook

研究開発におけるアイデアや日々の実験、活動をデジタルで記録し、各種データや知見の共有とデータの活用を促進する電子実験ノート。情報の共有のみならず、関連データの散逸を防ぎ、情報の検索性を向上することにより、実験の再現性の担保や重複実験の防止などを可能にし、研究期間の短縮とコスト削減を実現。

- 実験ノート作成にかかる工数の大幅な削減
- 情報の探索時間削減と組織を超えた情報共有
- データ管理の効率化と情報のサイロ化防止
- 過去に行った実験の再実験を防止
- 研究者間での知的財産、特許管理に関わるリスクの低減

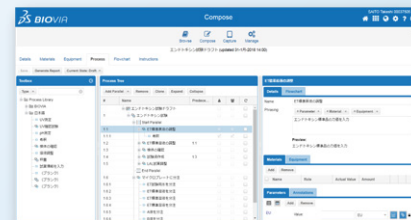
配合設計に必要な原料、配合、手順を管理、データベース化。法規制情報、原材料コストを配合情報と紐付けることにより、短期間でより望ましい配合条件の設計を支援。手作業と試行錯誤で実施していた配合設計とデータ管理を、Formulation Designerで一元的に実行することにより、配合設計の効率化を実現。

- 配合に関する情報を一元管理
- 複数の条件を満たす配合設計の支援
- コスト情報を意識した配合設計
- 法規制・コンプライアンスの遵守
- 試作・試験数の削減

配合情報管理: Formulation Designer

実験プロセス全体のデジタル化を行うラボエグゼキューションから、実験に必要な分析装置や資材、タスクの管理などのラボ・マネージメントまで、ラボのデジタルトランスフォーメーションを支援するラボ・オペレーション統合環境。実験プロセス、分析結果のデータは、ソリューション内で一元管理され、それぞれの業務、タスクを担うアプリケーションがシームレスに連携します。

- Compose、Capture: ラボ・エグゼキューション、SOPのデジタル化とSOPに沿った作業記録、実験の実施
- Task Plan、Samples、Equipment: ラボ・マネージメント、分析依頼、タスクの管理とサンプル、分析装置の管理
- CISPro: 資材マネージメント、試薬や実験資材の管理

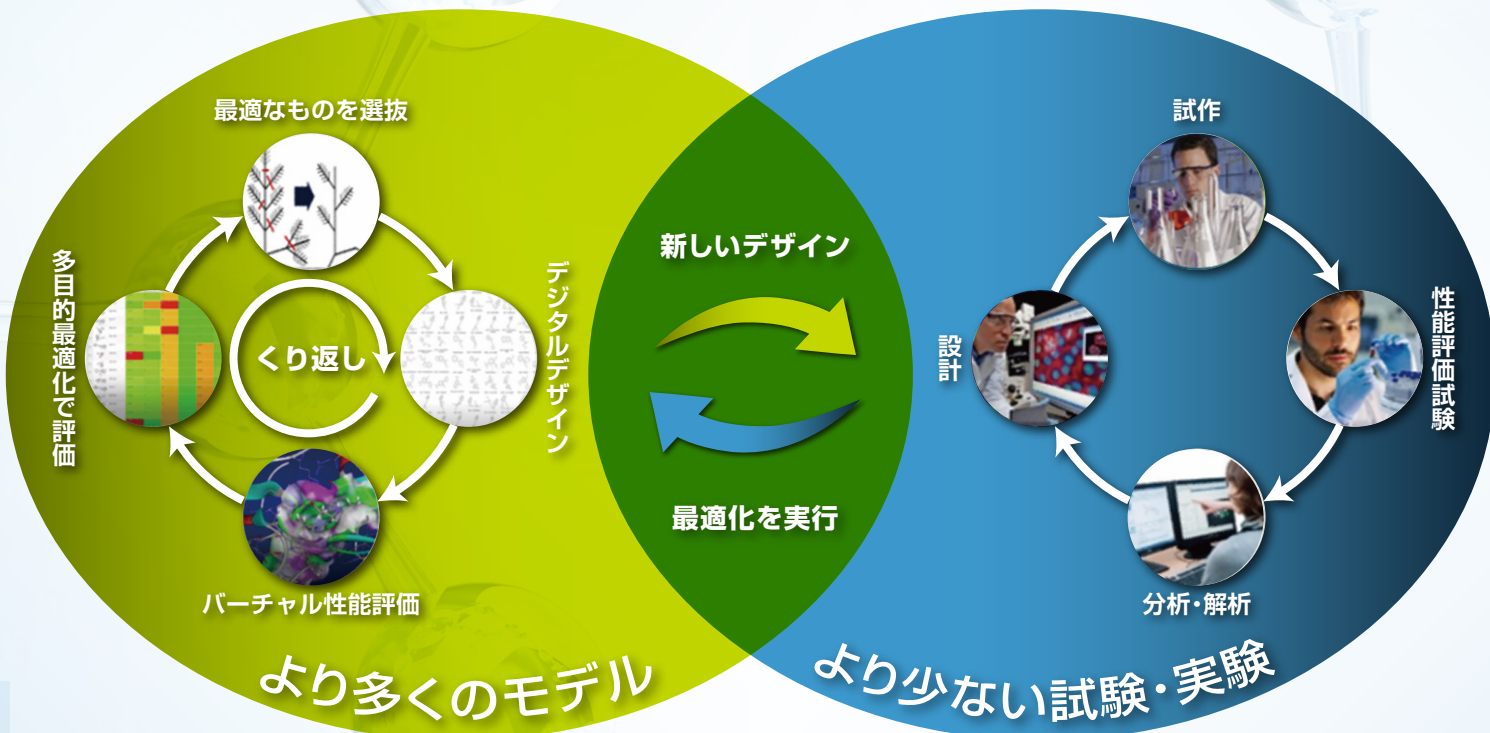


Compose:
実験・分析手順などの電子化



Capture:
Composeの手順に沿った
実験操作、結果の入力

Virtual + Real



実験科学者、計算科学者、データ科学者が協業して、科学的な成果を得ることを加速

データ科学者

マテリアルズ・インフォマティクス

- ジェネレーティブ・デザイン
- AIによる材料創生
- 機械学習による物性推算
- 配合/プロセス設計最適化

計算科学者

デジタルデザイン

- 分子設計
- 配合設計
- 物性推算
- 物理化学的原理の究明
- バーチャルスクリーニング

実験科学者

ラボのDX化・実験プロセス電子化

- 分子設計/配合設計/プロセス設計
- アイデア管理
- 研究資材、リソース管理
- デジタル記録
- 研究情報管理



3DEXPERIENCE®

サイエンティフィック・ツールとラボラトリデータ・マネジメント環境を提供

BIOVIAは、化学、材料、製薬分野の研究開発に特化したサイエンティフィック・ツールとラボラトリデータ・マネジメント環境を提供しています。多彩なアプリケーションを使って基礎研究、応用研究、開発研究の各ステージでイノベーションと製品開発を加速化し、研究開発における生産性やコンプライアンスの向上、コスト削減などを実現します。

