

BIOVIA PIPELINE PILOT MATERIALS STUDIO

データシート

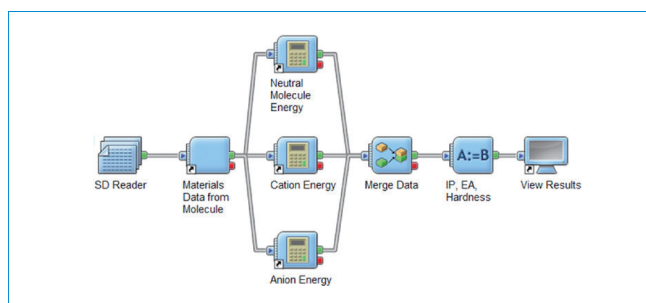
BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioは、新規材料開発に役立つ予測科学を、自動化されたワークフローに統合するソフトウェアソリューションです。BIOVIA Materials Studioに含まれる主要なシミュレーション・ツールがBIOVIA Pipeline Pilotに統合されます。

BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioは、BIOVIA Materials Studioの強力な材料特性予測機能とBIOVIA Pipeline Pilotの優れた科学ワークフローをキャプチャーし自動化や合理化を行う機能を組み合わせて、様々な分野で利用することができます。

従来の材料モデリングアプリケーションに比べて、自動化したい複雑なワークフローを迅速かつ簡単に作成し他の技術者と共有できます。また、自動化したワークフローを多くの類似した系に対して簡単に実行できます。他のBIOVIA Pipeline Pilotコレクションと併用すれば、より強化したワークフローを全社規模で導入できます。

BIOVIA PIPELINE PILOT MATERIALS STUDIOを使用すると、作業量を軽減し、生産性を高めることができます。

- 使いやすいグラフィカルなプログラミングによりマルチステップのワークフローを作成
- 計算を自動化し、重要な機能を全社規模で利用できるように Web ベースのアプリケーションとして導入
- 新しい並列処理オプションを利用して計算を高速化



複数の操作や計算を必要とするワークフローをキャプチャーし自動化できます。この例では、BIOVIA Materials Studio DMol³を使用して、一連の構造のイオン化ポテンシャル (IP)、電子親和力(EA)、化学的な硬さ (Chemical Hardness = $[IP-EA]/2$)、を算出しています。結果はグラフィカルに表示したり、並べ替えたり、後続のワークフローの入力データとして使用することができます。

作業負担を軽減する

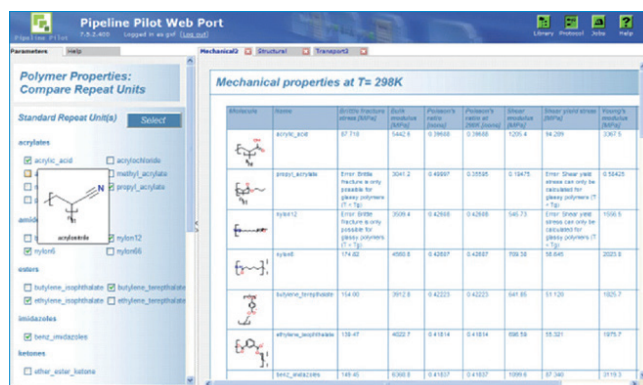
BIOVIA PIPELINE PILOT MATERIALS STUDIO

マルチステップのワークフローを作成

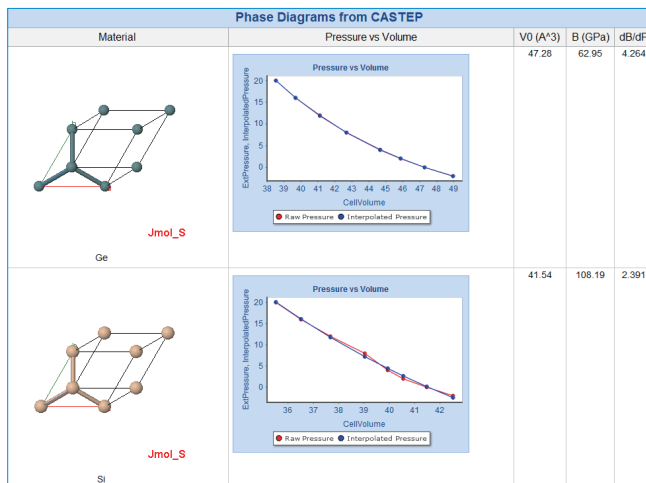
物性によっては、必要な結果を導き出すために、異なるプログラムを複数使用した計算が必要となる場合があります。たとえば、非晶質ポリマーの作成には、モノマーからポリマーの構築、単位格子のパッキング、MDを使った系の平衡化、アンサンブル平均の測定など、多くのステップを経る必要があります。このような処理を自動化することで、ユーザーは大きなメリットを得ることができます。BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioを使用すると、高度なワークフローを初心者でも簡単に作成できるため、時間を節約し、モデリング作業を簡略化することができます。

機能を自動化して全社規模で導入

多くの研究者が同じ物性計算を繰り返し行っています。BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioでは、数多くの計算を自動化できます。代表的なものには、生成熱、バンドギャップ、弾性定数、振動スペクトル、溶解パラメーターがあります。処理を自動化することにより、人為ミスは減少し、単調な計算作業から開放されます。ボタンをクリックするだけで、膨大な化合物に対して必要な物性計算を行い、カスタマイズ可能なレポートとして結果を出力できます。BIOVIA Pipeline Pilot Web Portを併用すれば、シンプルなWebベースのインターフェースを使用して社内の同僚にこうした計算を配布することもできます。



BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioでは、主要な機能を全社規模で配布可能な Web ポータルを作成できます。この例では、ポリマー物性を予測するコンポーネントを使用して、幅広い層のユーザーが構造を選択または入力して物性をリクエストできるツールを提供しています。結果は、見やすく共有も容易な表形式で表示されます。



複数のデータソースから一連の化合物を集め、その化合物に対して物性予測計算を行うワークフローの構築と実行が簡単になりました。粗視化並列処理で各計算を異なるサーバーに送信し実行するなどの操作や計算結果を自動的に照合し、レポートを作成する事なども容易にできます。

新しい並列処理オプションを利用して計算を高速化

多くの場合、新規材料開発や材料特性の最適化には膨大な計算とその処理が必要になります。圧力などの入力パラメータを段階的に変更し繰り返し計算したり、膨大な数の化合物や材料に対して同じ計算をしたり、同じ系に対して繰り返し同じ計算を実行して正確な統計平均を求める場合など、どのような場合でも、複数の計算を行うこととなります。BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioを使用すると、粗視化並列処理と細粒度並列処理の双方を使用した計算ができます。BIOVIA Pipeline Pilotでは、作業を計算用のサーバー、クラスター、コアに分配して計算リソースを最適な状態で使用できるようにし、結果を得るのにかかる時間を劇的に短縮します。

BIOVIA PIPELINE PILOT MATERIALS STUDIO概要

BIOVIA Pipeline Pilot Materials Studioでは、次のことを実現します。

- BIOVIA Materials Studio をドラッグアンドドロップでワークフローの構築や管理ができます
- さまざまな物性計算機能が提供されているため、複雑な物性予測計算ワークフローをキャプチャーできます
- 表示およびレポート作成機能が提供されており、BIOVIA Materials Studioとの相互運用も簡単にできます
- BIOVIA Pipeline Pilotとのシームレスな統合によりハイスループット計算を実現し、材料の新規開発や最適化を合理化します

BIOVIA PIPELINE PILOT MATERIALS STUDIOのコンポーネント

Classical Simulations Components

Amorphous Cell のコンポーネントを使用して、低分子や高分子の非晶質モデルを構築、分子を既存の構造にパッキングや、階層構造を作成します。作成後は、Forcite Plus の構造最適化コンポーネントおよび分子動力学コンポーネントにより、系を平衡化や時間依存特性を引き出すことが可能となります。凝集エネルギー密度、溶解パラメーター、弾性定数などの主要な物性を計算できます。

Quantum Mechanics Components

密度汎関数量子力学モジュールのCASTEPやDMol³を使用したエネルギー計算や構造最適化を分子や結晶に対して行います。反応性指数、バンド構造、状態密度、その他の電子物性など、さまざまな物性を予測します。高速の半経験的量子力学モジュールのVAMPより、無数の化合物をスクリーニングし、双極子モーメント、原子分極率、スペクトル、軌道エネルギー、溶媒効果などの物性を計算することができます。

Analysis Components

基本的な分析を実施し、角度、距離、ねじれ角などの分配といった幾何学的特性を検証します。動径分布関数、回転半径といった構造的特性を算出します。

Readers、Writers、Convertor Components

CIF、マルチフレームトラジェクトリ、スタディテーブルなどの一般的な構造形式を読み取ることができます。Materials Studioのネイティブの構造やスタディテーブルに書き込むことができます。またMaterialsデータ形式からChemistryデータ形式に相互変換し、他のコレクションの機能を利用できるようにします。

Crystallization Components

Polymorphコンポーネントを使用して、カスタムの多形体予測ワークフローを作成できます。BIOVIA Pipeline Pilot環境を使用して粗視化並列処理を実現することにより、空間群ごとに異なるCPUに送信できます。

Manipulator Components

一連の分子を読み込み、水素を自動的に付加や構造の初期的なクリーニングなどが実行できます。結晶や階層構造の構築、系の対称性を完全に操作できます。新しいトラジェクトリを作成したり、トラジェクトリを読み込んで分割できます。

Property Calculator Components

系の周期性、分子量や原子の電荷といった単純な物性を計算します。ChiやKappa指数などは、BIOVIA Pipeline Pilot Data Modeling&statisticsの強力なモデル構築ツールで構造物性相関(QSAR)モデルを構築するための記述子となります。

MaterialsScript Components

別のワークフローにドラッグアンドドロップしたり顧客に配布したりできるカスタムのコンポーネントを作成することにより、MaterialsScriptのすべての機能を利用できます。パイプラインに追加できるように物性計算機能を拡張します。

Polymer Property Components

Bicerano氏による『Prediction of Polymer Properties』¹の最新版に基づき、ポリマー物性をすばやく簡単に計算します。ガラス転移温度、熱伝導率、界面張力などの物性を推定します。

Viewer、Reporting Components

Jmolビューアを使用して分子と結晶の構造をウェブブラウザで視覚化できます。静止画像としての表示や、インターアクティブに回転可能なモデル、アニメーション化可能なトラジェクトリをWebページやさまざまなドキュメントに埋め込むことができます。

ABOUT BIOVIA FOUNDATION

BIOVIA Foundationは、さまざまな場所に保存されているデータから科学的価値を引き出し、科学的ワークフローを自動化して、より広範な科学コミュニティでのコラボレーションを促進することにより、研究開発組織の技術革新を支援する、拡張性に富んだ大規模サイエンティフィック・インフォマティクス・プラットフォームです。BIOVIA Pipeline Pilot

のコンポーネントコレクションはプラットフォームの科学的な構成要素であり、科学的なカテゴリや機能でグループ化されています。コンポーネントをグラフィカルに組み合わせることで、データの取得、フィルタリング、分析、レポート作成のワークフローを作成できます。

1. J. Bicerano, Prediction of Polymer Properties, Marcel Dekker, Inc., New York, 2002.1

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 Systèmes. All rights reserved. 3DEXPERIENCE, CATIA, SOLIDWORKS, ENOVIA, DELMIA, 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

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

BIOVIA Asia Pacific
ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社
141-6020
東京都品川区大崎 2-1-1
ThinkPark Tower

BIOVIA Americas
BIOVIA
5005 Wateridge Vista Dr.,
San Diego, CA
92121 USA