

BIOVIA USER GROUP MEETING 2023
バーチャルとリアルを融合する R&D の変革

2023 年 11 月 24 日 (金)

AGENDA



3DEXPERIENCE[®]

【BIOVIA User Group Meeting 開催のお知らせ】

BIOVIA は 2023 年 11 月 24 日 (金) に東京コンファレンスセンター・品川 5F にて「BIOVIA User Group Meeting Japan 2023」を開催致します。

サステナブルな社会を目指すために、環境負荷の低減、CO2 排出量の削減や省エネルギー性能の向上は、製品開発において必須要件となり、これらは、研究開発の推進とイノベーションにより取組む課題であると言えます。

このような状況において、化学、材料、製薬分野において、BIOVIA はシミュレーションやデータサイエンスなどのサイエンスツールと、研究開発データマネジメント環境を提供し、企業の研究開発の促進と変革に貢献しています。

BIOVIA User Group Meeting Japan 2023 では、BIOVIA のブランドビジョンや 2024 年以降の製品開発計画、BIOVIA 製品をご活用いただいておりますお客様の事例講演をお届けいたします。幅広いテーマを取り上げることで、各ステージで新製品を研究開発する皆様の一助となれば幸いにございます。

皆様のご参加を心よりお待ちしております。

ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA ブランド

【開催概要】

タイトル	BIOVIA User Group Meeting Japan 2023 ~バーチャルとリアルを融合する R&D の変革
開催日	2023 年 11 月 24 日 (金) 10:00 - 17:30
会場	会場：東京コンファレンスセンター・品川 5F
費用	無料 (事前登録制)
主催	ダッソー・システムズ株式会社
構成	<ul style="list-style-type: none">• BIOVIA 事業戦略• R&D からの製品アップデート、ロードマップ• 基調講演• ユーザー様からの事例発表• BIOVIA 日本スタッフによる事例紹介、ソリューション紹介
対象業界	化学・エネルギー、一般消費財、自動車、ハイテク、産業機械、ライフサイエンス業界向けユーザー会

【みどころ】

・基調講演として、九州大学 カーボンニュートラルエネルギー国際研究所 教授 石原 達己様より、ポスト Li イオン電池の開発への計算化学の応用と題しまして、ご講演をいただきます。

・午後のブレイクアウトセッションの各トラックに於きまして、企業、アカデミアから多数のユーザー事例を、ご講演いただきます。

・BIOVIA からは今後の事業戦略や R&D から新ソリューションの紹介や製品ロードマップをご紹介させていただきます。

【ご注意事項】

・お申込み多数の場合は、参加お申し込み受付を締め切ることがあります。お問合せの時点でお申し込みが終了している場合もありますので、御了承願います。

・本イベントの録画・録音等は、禁止といたします。講演は著作物であり、著作権が発生します。講師や主催側に無許可で録画や撮影したり、インターネット上で公開したりした場合には著作権法違反となり、違反すると個人の場合 10 年以下の懲役又は 1,000 万円以下の罰金が発生する可能性もあります。

【お申込み】

・ <https://events.3ds.com/ja/user-group-meeting-japan-biovia-2023>

BIOVIA User Group Meeting 2023 プログラム

AM				プレナリーセッション		
10:00	開会のご挨拶 ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA ブランドマネージャー 菅谷 信敬					
10:05	BIOVIA Vision and Direction CEO R&D Vice President, Jason BENEDICT (Video Message) Strategy Vice President, Reza SADEGHI					
10:15	BIOVIA の展望と事業戦略 (日本語による BIOVIA Vision and Direction と Road Map and Updates 2024 の要約) ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA ブランドマネージャー 菅谷 信敬					
10:30	BIOVIA Product Road Map and Updates 2024 BIOVIA Roles Portfolio Director, Julian WILLMOTT Roles Portfolio Engineering Senior Manager, James WESCOTT R&D Scientific Application Director, Jens REINISCH					
11:30	【基調講演】ポスト Li イオン電池の開発への計算化学の応用 九州大学 カーボンニュートラルエネルギー国際研究所 教授 石原 達己					
12:00	ランチ					
ブレイクアウトセッション						
PM	Material Science	Life Science		Laboratory		
13:30	分子シミュレーションを用いた 接着剤 / 接着界面の解析 株式会社スリーポンド研究開発本部 技術マーケティング部 技術開発課 課長 大槻 直也	Virtual から Real へ - 効率的なライブラリ構築と QC - 大塚製薬株式会社創薬化学研究所 主任研究員 田井 国憲		電子実験ノートの機能拡張及び その活用例の紹介 BIOVIA IC 西脇 理		
14:10	休憩					
14:20	BIOVIA COSMO-RS in the Chemical Industry: A Use Case Based Value Perspective Bridging the Mesoscale with Materials Studio BIOVIA R&D Scientific Application Director, Jens REINISCH Roles Portfolio Engineering Senior Manager, James WESCOTT	ラボ DX の現状と Cloud ベース電子実験ノート LSE BIOVIA IC Brandon Ryu Dolan		カネカにおける電子実験ノートを 活用した DX への取組み 株式会社カネカ R & B 戦略室 兼 テーマ推進 & DX 室 幹部職 神田 彰久		
15:00	休憩					
15:10	グリーンサステナブル半導体製造プロセスの 開発に向けた新材料開発 産業技術総合研究所 エレクトロニクス・製造領域・研究企画室 室長 内田 紀行	ラボ運用管理エコシステム： BIOVIA Laboratory Operations LSE BIOVIA IC Brandon Ryu Dolan		Wacker Chemie における BIOVIA Notebook のグローバル展開 (海外のユーザ事例を BIOVIA 担当が紹介) BIOVIA IC マネージャ 笠井俊宏		
15:50	休憩					
16:00	Pipeline Pilot や MaterialsScript による Materials Studio の拡張 BIOVIA IC 桑原 理一	BIOVIA Data Science ソリューション BIOVIA IC Joey LIN		Formulation Scientist - an user journey/experience (海外のユーザ事例を BIOVIA 担当が紹介) BIOVIA Roles Portfolio Director, Julian WILLMOTT		
16:40	休憩					
16:50	CASTEP を利用した ELNES/XANES データベースの作成と機械学習を活用した スペクトル解析 東京大学 生産技術研究所 教授 溝口 照康	サブセット AI スクリーニング (SAS) 手法の構築について 日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 高槻リサーチセンター 主幹研究員 堀 浩一郎		配合開発環境のデジタル化で変える 研究開発の未来 BIOVIA IC 亀井 理恵		
18:00	ネットワーキングパーティ・懇親会					

* プログラムは予期なく変更される場合がございますこと、予めご了承ください

BIOVIA User Group Meeting 2023 午前の部：Plenary Session 基調講演

Time	Duration	Content
午前の部 (Plenary Session・基調講演)		
10:00 - 10:05	5 min	開会のご挨拶 ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA ブランドマネージャー 菅谷 信敬
10:05 - 10:15	10 min	BIOVIA Vision and Direction CEO R&D Vice President, Jason BENEDICT (Video Message) Strategy Vice President, Reza SADEGHI
10:15 - 10:30	15 min	BIOVIA の展望と事業戦略 (日本語による BIOVIA Vision and Direction と Road Map and Updates 2024 の要約) ダッソー・システムズ株式会社 BIOVIA ブランドマネージャー 菅谷 信敬
10:30 - 11:30	60 min	BIOVIA Product Road Map and Updates 2024 BIOVIA Roles Portfolio Director, Julian WILLMOTT Roles Portfolio Engineering Senior Manager, James WESCOTT R&D Scientific Application Director, Jens REINISCH
11:30 - 12:00	30 min	【基調講演】ポスト Li イオン電池の開発への計算化学の応用 九州大学 カーボンニュートラルエネルギー国際研究所 教授 石原 達己 本講演ではポスト Li イオン電池として期待されている空気電池について、酸素還元と酸素放出へ活性の高い触媒の開発と計算化学による解析を紹介する。また、溶媒和構造についても計算化学と実験による取り組みを紹介する。一方、両極に炭素を用いたデュアル炭素電池のインタカレーションしたアニオンの電子状態への計算化学と実験による取り組みを紹介する。
12:00 - 13:30	1 h 30 min	ランチ

* プログラムは予期なく変更される場合がございますこと、予めご了承ください

BIOVIA User Group Meeting 2023 午後の部トラック 1 : Virtual - Material Science

午後の部 (VIRTUAL - Material Science)		
13:30 - 14:10	40 min	<p>分子シミュレーションを用いた接着剤 / 接着界面の解析 株式会社スリーボンド 研究開発本部 技術マーケティング部 技術開発課 課長 大槻 直也</p> <p>分子動力学シミュレーション (Materials Studio Forcite) を用い、接着界面の現象理解や弾性率などの接着剤の硬化物の物性、接着界面への水分の浸透といった「接着剤にまつわる現象」を調査した事例について紹介させて頂く。</p>
14:10 - 14:20	10 min	休憩
14:20 - 15:00	40 min	<p>BIOVIA COSMO-RS in the Chemical Industry: A Use Case Based Value Perspective BIOVIA R&D Scientific Application Director, Jens REINISCH</p> <p>BIOVIA COSMOtherm and the underlying theory COSMO-RS are used for computer modeling in chemical industry for over 2 decades. They have demonstrated value in many fields such as predicting activity coefficients & supporting process simulations, solubility prediction, VLE/LLE, separation, purification and chemical reactions. While many modeling experts and chemical engineers heard about COSMO-RS or even use it, the value and limitations of the solutions are often not obvious to a wider audience. In this use case study, we show where COSMOtherm has demonstrated value in the chemical industry and where its limitations are.</p> <p>Bridging the Mesoscale with Materials Studio BIOVIA Roles Portfolio Engineering Senior Manager, James WESCOTT</p> <p>Finite element simulation software, such as SIMULIA Abaqus as well as systems based performance models, such as CATIA Dymola provide a hugely powerful way to efficiently test the mechanical, electrical, thermal performance of product designs. However, it is challenging to find or create mathematical models that accurately represent the behaviour of the assigned materials across a broad range of scenarios. This limits the range of virtual designs that can be explored. Molecular modeling and simulation on the other hand can bring a bottom up approach that has the potential to explore material complexities as a function of composition, conditions and processing. However, in creating materials models for use in virtual designs from such simulations it is necessary to take structural features emerging at meso to microscales (1nm to 1 micron) into particular consideration. In this talk I will discuss the Materials Studio based workflows we have established for bridging mesoscales and new simulation capabilities which extend into the CAE domain of granular materials, including parameters associated with their manufacture.</p>
15:00 - 15:10	10 min	休憩
15:10 - 15:50	40 min	<p>グリーンサステナブル半導体製造プロセスの開発に向けた新材料開発 産業技術総合研究所 エレクトロニクス・製造領域・研究企画室 室長 内田 紀行</p> <p>半導体製造プロセスのグリーン化は喫緊の課題となっており、国内外でその対策が始まっている。グリーン化のカギの一つは、微細化の追求により劇的に増加している製造プロセスの工程数の削減である。28nm テクノロジーノードでは、およそ 500 工程であったウェーハプロセスは、3nm に到達して 1300 工程を超えており、カーボンエMISSIONの増大を招いている。本講演では、プロセスの新材料を開発し、工程数、使用材料をともに低減し、かつ、既存のデバイス性能を向上させるプロセスの提案を行った事例を題材に、その中で、DFT 計算をどのように活用しているか紹介したい。</p>
15:50 - 16:00	10 min	休憩
16:00 - 16:40	40 min	<p>Pipeline Pilot や MaterialsScript による Materials Studio の拡張 BIOVIA ソリューション・コンサルタント 桑原 理一</p> <p>ユーザー様からご要望頂いた機能を Pipeline Pilot や MaterialsScript を用いて Materials Studio で実現した例をご紹介します。当日ご発表頂くユーザー様の事例でも使われている、化学反応を仮想的に取り扱う分子動力学シミュレーションや、CASTEP および ONETEP を使った XPS のシミュレーションや、その他の応用例をご紹介します。</p>
16:40 - 16:50	10 min	休憩
16:50 - 17:30	40 min	<p>CASTEP を利用した ELNES/XANES データベースの作成と機械学習を活用したスペクトル解析 東京大学 生産技術研究所 教授 溝口 照康</p> <p>第一原理平面波基底法の CASTEP コードを用いることで、内殻電子励起スペクトル (ELNES/XANES) の理論計算を高精度かつ高速に行うことができる。発表者らはこれまでに、CASTEP を用いて約 2 万個の有機分子の炭素 K 端のデータベースを構築し公開している。さらに、同データベースを機械学習により解析し、本来 ELNES/XANES スペクトルとは無関係と考えられてきた情報の抽出に成功している。本発表では、CASTEP-ELNES を用いたスペクトルデータベースの構築と機械学習を活用したスペクトル解析について紹介する。</p>
18:00 - 19:30	1 h 30 min	ネットワーキングパーティ・懇親会

* プログラムは予期なく変更される場合がございますこと、予めご了承ください

BIOVIA User Group Meeting 2023 午後の部トラック 2 : Virtual - Life Science

午後の部 (VIRTUAL - Life Science)		
13:30 - 14:10	40 min	<p>Virtual から Real へ - 効率的なライブラリ構築と QC - 大塚製薬株式会社創薬化学研究所 主任研究員 田井 国憲</p> <p>Virtual な化合物ライブラリは Ring / Chain の組み合わせ等で簡単に構築することができる。しかしながら Real なライブラリにおいては、原料調達・工程数・反応性等により合成困難な化合物も多く、さらに安定性・着色等の問題により HTS に不適切なものとなることもある。Virtual な組み合わせとリンクさせるために、新しい反応のパラレル合成への適用・対応するビルディングブロックの補完等を行い、ライブラリ合成を行っている。各種スクリーニング用ライブラリの利用可否の判断は、LC/MS の自動測定・自動レポートシステムを構築し効率化を行っている。これら Pipeline Pilot を用いた活用事例について紹介する。</p>
14:10 - 14:20	10 min	休憩
14:20 - 15:00	40 min	<p>ラボ DX の現状と Cloud ベース電子実験ノート LSE BIOVIA ソリューション・コンサルタント Brandon Ryu Dolan</p> <p>研究開発ラボにおいては日々膨大な実験データが生成されており、その記録・保存そして活用は共通の課題となっています。DX (デジタルトランスフォーメーション) の取り組みによって、研究開発ラボでの膨大なデータの管理・活用が進められています。本セミナーでは、BIOVIA Scientific Notebook を導入するメリットや 3DEXPERIENCE Platform 上の他のソリューションとの連携がもたらす効果について、より詳しくご紹介させていただきます。</p>
15:00 - 15:10	10 min	休憩
15:10 - 15:50	40 min	<p>ラボ運用管理エコシステム : BIOVIA Laboratory Operations LSE BIOVIA ソリューション・コンサルタント Brandon Ryu Dolan</p> <p>ラボ内には非常に多くのワークフローがあり、様々な機能に特化したアプリケーションがあるため、ソリューションを最大限に活用する事が課題になっています。研究・開発・分析・QA/QC などの業務を行っているラボにおいて、分析やプロセスの流れを統合化・一体化・標準化を実現できる次世代ソリューション、3DEXPERIENCE Platform の BIOVIA Laboratory Operations をご紹介します。</p>
15:50 - 16:00	10 min	休憩
16:00 - 16:40	40 min	<p>BIOVIA Data Science ソリューション BIOVIA インダストリー・プロセス・コンサルタント Joey LIN</p> <p>研究から開発、スケールアップ、製造、品質管理まで、研究開発の全体プロセスにおいて、BIOVIA はデータサイエンス系のソリューションを提供しています。Pipeline Pilot, Insight, Generative Therapeutics Design などの BIOVIA 製品を活用することで、仮想設計により実験時間を削減し、コストを削減しつつ研究活動の効率向上に貢献することができます。</p>
16:40 - 16:50	10 min	休憩
16:50 - 17:30	40 min	<p>サブセット AI スクリーニング (SAS) 手法の構築について 日本たばこ産業株式会社 医薬総合研究所 高槻リサーチセンター 主幹研究員 堀 浩一郎</p> <p>サブセットスクリーニングに機械学習の技術を組み込むことで、ランダムスクリーニング全体のわずか 4% の化合物をスクリーニングするだけでヒット化合物全体の 80% を取得可能なスクリーニング手法を紹介する。化合物の新たな Descriptor である「Bio-fingerprint」や「mol2vec」、および Data Robot との連動にも触れる。</p>
18:00 - 19:30	1 h 30 min	ネットワーキングパーティ・懇親会

* プログラムは予期なく変更される場合がございますこと、予めご了承ください

BIOVIA User Group Meeting 2023 午後の部トラック 3：Real - Laboratory

午後の部 (REAL - Laboratory)		
13:30 - 14:10	40 min	<p>電子実験ノートの機能拡張及びその活用例の紹介 BIOVIA インダストリー・プロセス・コンサルタント 西脇宙理</p> <p>電子実験ノート「BIOVIA Notebook」は、データサイエンスツール「BIOVIA Pipeline Pilot」との連携により、データ活用のための様々な機能を追加することが可能です。本セッションでは、Notebookからの図表の自動出力をはじめ、Notebookの利用率を可視化する方法、またマテリアルズ・インフォマティクスの枠組みの構築など、データ活用に向けた機能追加について紹介させていただきます。</p>
14:10 - 14:20	10 min	休憩
14:20 - 15:00	40 min	<p>カネカにおける電子実験ノートを活用したDXへの取り組み 株式会社カネカ R & B 戦略室 兼 テーマ推進&DX室 幹部職 神田 彰久</p> <p>カネカでは全社的にDXを加速しており、研究部門では2020年度からBIOVIA Notebookの導入を段階的に進めている。当社は多様な事業分野を持つため、親和性の高いライフサイエンス部門を先行させ、効果を検証した上で、材料系の部門への導入を始め、Pipeline Pilotでのツール開発によりさらなる活用を狙っている。</p>
15:00 - 15:10	10 min	休憩
15:10 - 15:50	40 min	<p>Wacker Chemie における BIOVIA Notebook のグローバル展開 (海外のユーザ事例を BIOVIA 担当が紹介) インダストリー・コンサルタント・マネージャ 笠井俊宏</p> <p>Wacker Chemie AG は電子材料やヘルスケア向け材料を手掛けるベルリンに本社を置く化学メーカーです。Wacker では電子実験ノートを以前から使用していましたが、この度、BIOVIA Notebook をグローバル標準の電子実験ノートとして導入しました。このセッションでは BIOVIA Notebook のグローバル展開の経緯を BIOVIA スタッフが日本語に紹介いたします。</p>
15:50 - 16:00	10 min	休憩
16:00 - 16:40	40 min	<p>Formulation Scientist – an user journey/experience (海外のユーザ事例を BIOVIA 担当が紹介) BIOVIA Roles Portfolio Director, Julian WILLMOTT</p> <p>A look at a deployment and usability of this new BIOVIA 3DEXPERIENCE Cloud role for Formulators who want a new experience to design, manage and make their formulations</p>
16:40 - 16:50	10 min	休憩
16:50 - 17:30	40 min	<p>配合開発環境のデジタル化で変える研究開発の未来 BIOVIA インダストリー・プロセス・コンサルタント 亀井 理恵</p> <p>消費財および化学業界では、様々な形態の配合開発が日々行われています。これまで以上に消費者の期待が高まり、環境配慮や法規制遵守への対応が増している中で、製品の品質と持続可能性は不可分の要素となっています。そのような中、様々な形態の製品を管理する基盤が構築されていない、性能を担保するための製造条件の検討段階で生じた膨大な配合および試作試験のデータの管理ができていないといった課題があります。今回は、お客様の資産である研究開発段階におけるデータの蓄積、そしてこれらのデータを活用した配合最適化を行うことができるプラットフォームの紹介をいたします。</p>
18:00 - 19:30	1 h 30 min	ネットワーキングパーティ・懇親会

* プログラムは予期なく変更される場合がございますこと、予めご了承ください