

# 2025 年 11 月 13 日

10:00 AM

Plenary Sessions

## Opening remarks

PS

可児 大始、BIOVIA アジアパシフィック ディレクター  
菅谷 信敬、BIOVIA ジャパン セールス シニアマネージャー  
西 基秀、ライフサイエンス、ジャパンセールス  
バイスプレジデント  
開会の挨拶

10:05 AM – 10:35 AM

Plenary Sessions

## BIOVIA CEO SESSION

PS

Jason Benedict, CEO, BIOVIA  
Reza Sadeghi, CSO, BIOVIA  
BIOVIA ビジョンとディレクション

10:35 AM – 11:25 AM

Plenary Sessions

## R&D SESSION

PS

Gene Tetreault, BIOVIA Portfolio Director  
BIOVIA R&D: From Molecule to Manufacturing  
(日本語訳: BIOVIA R&D: 分子から製造へ)

## Key Note セッション

### Volume to Value, Scaling Compliance and Productivity: Our BIOVIA ONE Lab Journey

(日本語訳:ボリューム・トゥ・バリュー、コンプライアンスと生産性の拡大:BIOVIA ONE Labとのジャーニー)

Ashok Nayak, Ipcा Laboratories Limited

**As a leading generics organization, Ipcा manages a diverse portfolio of high-volume products while adhering to multiple global regulatory standards. To remain competitive and future-ready, digitization has become a strategic imperative. In this transformation journey, Ipcा has adopted BIOVIA ONE Lab as its digital QC lab platform to streamline operations, ensure compliance, and drive efficiency.**

(日本語訳:Ipcाはジェネリック医薬品のリーディングカンパニーとして、医薬品の多様なポートフォリオを管理しています。

各国の規制を遵守しながら医薬品の大量生産の製品規制の基準や競争力を維持しつつ将来に備えるには、AIの活用やデジタル化を取り入れることは戦略的に必須となっています。

Ipcाはこのような環境下において変革の一路として BIOVIA ONE Labを使用し業務を合理化し、コンプライアンスを確保するためのデジタル QC ラボプラットフォームとともに効率を高めています。)

PS

## Key Note セッション

### コンピュータ化学草創期の挑戦 –

### Materials Studio25 周年を祝して –

東北大學 IRIC 株式会社

名誉教授、代表取締役

宮本 明

1946 年のコンピュータ誕生以来、量子化学計算や反応装置解析など化学分野での活用が進展してきました。1980 年代後半にはコンピュータグラフィックスの導入により、化学を超えて幅広い学問・産業分野での発展が加速しました。本講演では、1987 年に開始した可視化研究から、1990 年代以降の自動車、半導体、環境、原子力など多分野との連携に至る取り組みを振り返ります。具体的な事例を交えながら、その成果と意義を紹介します。

13:15 PM – 13:50 PM

Modeling &amp; Simulation

M&amp;S

## 生成 AI と機械学習ポテンシャルによる物質設計と計測データ解析

東京大学

生産技術研究所

教授

溝口 照康

近年、機械学習を活用した材料開発が急速に進展している。2007 年に Behler と Parrinello によって提案された機械学習ポテンシャル (MLP) は、高精度かつ高速な原子スケールシミュレーションを可能とする手法として発展を遂げており、近年では周期表のほぼ全元素に対応可能な事前学習済みの汎用ポテンシャル (例: MACE) も登場している。一方で、ChatGPT や Stable Diffusion に代表される生成 AI も広く普及し、それらの技術を応用した物質の逆設計やデータ解析も注目を集めている。本発表では、発表者の研究グループが近年取り組んでいる、機械学習ポテンシャルを用いた電場下での

強誘電体シミュレーションや、生成 AI を活用した物質の逆設計および計測データの解析手法について紹介する。

13:55 PM – 14:30 PM **Modeling & Simulation**



## **Computational Insights in CO<sub>2</sub> Capture: An Industrial Perspective**

(日本語訳：CO<sub>2</sub> 回収における計算的洞察: 産業の視点)

**Dr. Anirban Bhaduri**

**Computational Chemistry and Materials Sciences -  
Manager - Shell Technology Center – Bangalore, Shell Plc**

Development of sustainable and efficient processes is a desired interest for industries. Understanding key technological bottlenecks in the process is thus essential. Molecular and atomistic scale simulations and computation provide key insights into chemical transformations. These lead towards actions associated with new material discovery, process optimization and eventually to enhanced yields. During the talk, three examples will be shared on how we utilize these approaches to optimize catalysts, screen new materials and evaluate process enhancement. The talk will reference how these approaches are being used to address and build decarbonization solutions.

(日本語訳：持続可能で効率的なプロセスの開発は、産業界にとって望ましい関心事です。したがって、プロセスにおける主要な技術的ボトルネックを理解することが不可欠です。分子スケールと原子スケールのシミュレーションと計算は、化学変換に関する重要な洞察を提供します。これらは、新材料の発見、プロセスの最適化、そして最終的には歩留まりの向上に関連するアクションにつながります。本講演では、触媒の最適化、新材料のスクリーニング、プロセス強化の評価のためにこれらのアプローチをどのように活用するかについて、3つの例を共有します。そして、これらのアプローチが脱炭素化ソリューションに対処し、構築するためにどのように使用されているかについて言及します。

## マルチスケール・マルチフィジックスアプローチによる軟磁性材料 FeCo-V の磁気劣化評価：GRIT（やり抜く力）×第一原理計算を用いた材料設計手法（第一原理解析）

株式会社 IHI

IHI グループ高度専門家

（物理・材料：第一原理計算を用いた材料設計手法

（第一原理解析））基盤物理・化学技術部主幹研究員

江口 晴樹

本講演では、軟磁性材料分野におけるマルチスケール・マルチフィジックスアプローチの活用事例として、FeCo-V 合金の磁気劣化評価を紹介します。弾性ステイップネス解析とマイクロマグネティックシミュレーションを組み合わせ、磁束密度-磁場（B-H）曲線や磁束密度-磁歪（B- $\epsilon$ ）曲線を解析した結果、予ひずみが磁束密度の減少と磁歪の増加をもたらすことを明らかにしました。材料開発現場では、計算と実験のズレをどう捉え、次の一手につなげるかが重要です。やり抜く力（GRIT）を持つ研究者の視点が、技術価値の最大化に直結することを考察します。参考文献：Haruki Eguchi, Natsuki Yoneyama, Masakazu Hara, Shinnosuke Nakai, Hiroyuki Nose, Hiroki Yoshizawa, Evaluating magnetic degradation in FeCo-V alloys for high-output and compact electric motors: A multiscale-multiphysics approach, Materials Letters, 382 (2025) 137937, <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2024.137937>



## Advanced in Materials Modeling: Focus on Glasses

(日本語訳：材料モデリングの高度: ガラスに焦点を当てる)

SungHoon Lee

Principal Research Scientist, Ph.D. - Corning Precision Materials

This presentation aims to explore the latest advancements in glass technology, emphasizing the development of antimicrobial glass and the enhancement of glass-polymer adhesion. By delving into these two key topics, we will highlight the role of materials modeling in driving these innovations and their potential applications. The research utilizes density functional theory and molecular dynamics techniques to simulate the properties and interactions of glass at the molecular level. In the realm of antimicrobial glass, structural analyses of various glass compositions are conducted to identify effect of glass former that effectively enhance chemical durability. The study of glass-polymer adhesion emphasizes interfacial chemistry and surface roughness, aiming to optimize bonding between these materials for improved durability and performance.

(日本語訳：このプレゼンテーションは、抗菌ガラスの開発とガラスとポリマーの接着力の強化を強調し、ガラス技術の最新の進歩を探ることを目的としています。これら2つの重要なトピックを掘り下げることで、これらのイノベーションとその潜在的な用途を推進する上での材料モデリングの役割に焦点を当てる。この研究では、密度汎関数理論と分子動力学技術を利用して、ガラスの特性と相互作用を分子レベルでシミュレートします。抗菌ガラスの分野では、化学的耐久性を効果的に向上させるガラス形成剤の効果を特定するために、さまざまなガラス組成の構造解析が行われています。ガラスとポリマーの接着の研究では、界面化学と表面粗さが強調され、耐久性と性能を向上させるためにこれらの材料間の結合を最適化することを目的としています。)

M&amp;S

## 自動車排ガス浄化触媒に対する量子化学計算の活用事例

スズキ株式会社

環境・材料・生産技術開発部

係長

三浦 和也

ガソリンエンジン自動車用の排ガス浄化触媒（三元触媒）をターゲットとして量子化学計算を活用した研究事例を 2 つ紹介する。1 つ目は新規な三元触媒材料を設計する技術として、量子化学計算と化学反応速度論のシミュレーションを組み合わせた連成解析により、浄化率曲線を予測する技術を紹介する。2 つ目は基礎研究的な調査として Temkin 型の吸着、つまり物質表面における分子の吸着エネルギーが被覆率の 1 次式で近似表現されるとの経験則について、詳しく考察した事例を紹介する。

M&amp;S

## Molecular Modeling 2026

(日本語訳：分子モデリング 2026)

Stephen Todd, BIOVIA

In recent years, there has been a growing integration of physics-based models with machine learning approaches to enhance the speed and accuracy of existing computational methods. This presentation will explore the latest improvements in Materials Studio and Discovery, focusing on new methodologies and important updates to existing solvers. We will also discuss a collaborative effort involving quantum computing. As these solvers continue to advance, the way we interact with the tools also evolves. Last year, a key functionality called "Virtual Lab" within the 3DEXperience platform was introduced, and this session will present the new enhancements to that system.

(日本語訳：近年、既存の計算手法の速度と精度を向上させるために、物理ベースのモデルと機械学習アプローチの統合が進んでいます。このプレゼンテーションでは、新しい方法論と既存のソルバーの重要な更新に焦点を当てて、Materials Studio と Discovery の最新の改善点について説明します。また、量子コンピューティングを含む共同作業についても説明します。これらのソルバーが進歩し続けるにつれて、ツールとの対話方法も進化します。昨年、3DEXperience プラットフォーム内に「バーチャルラボ」と呼ばれる重要な機能が導入されましたが、本セッションでは、そのシステムの新しい機能強化を紹介します。)

**Data Science &  
Informatics**

13:15 PM – 13:55 PM



## 電子実験ノートを用いた実験データ蓄積と 材料開発の加速

日東電工株式会社

研究開発本部 基幹技術研究センター データサイエンス

第2 グループ

島津 佑汰

本講演では、日東電工における電子実験ノートと Pipeline Pilot を核としたデータ基盤の構築と運用に関して紹介する。弊社では、Excel フォーマットにより実験データを構造化し、Pipeline Pilot にて前処理・自動蓄積を行い、解析プラットフォームに連携する仕組みを実装した。これにより、記録から検索、処理に至る工数ならびにエラーの大幅削減、蓄積データの横断的活用、材料開発の意思決定を加速する効果が期待される。本講演では、その具体的な取り組みと得られた効果を共有する。

14:00 PM – 14:40 PM

## Virtual Twin Experiences & Predictive Modeling

(日本語訳：バーチャルツイン エクスペリエンス と予測モデリング)

Reza Sadeghi, **BIOVIA**

Amit Kulkarni, **BIOVIA** Industry Process Consultant,  
Senior Director

### Virtual Twin Experiences & Predictive Modeling

Virtual Twin Experiences (VTEs) are transforming innovation across industries by enabling a connected, predictive, and sustainable approach to design and development. This presentation will demonstrate how VTEs, powered by the accessible, subscription-based 3DEXPERIENCE cloud platform, integrate advanced AI-driven modeling and multiscale simulations to revolutionize traditional workflows in both Materials and Life Sciences. In materials innovation, VTEs accelerate the entire lifecycle—from selection and design to utilization and recycling—driving efficiency and sustainability. In Life Sciences, VTEs redefine the drug lifecycle, integrating validated Virtual Twins and predictive models to enhance discovery, development, manufacturing, and delivery. Together, these examples showcase how VTEs unify data, modeling, and collaboration to foster innovation, improve decision-making, and enable a more sustainable and patient-centered future.

(日本語訳：バーチャルツインエクスペリエンス(VTE)は、設計と開発を予測的かつ持続可能なアプローチを可能にすることで、業界全体のイノベーションを変革しています。このプレゼンテーションでは、アクセス可能なサブスクリプションベースの3DEXPERIENCE クラウド・プラットフォームを活用した VTE が、高度な AI 駆動型モデリングとマルチスケール・シミュレーションを統合して、材料とライフサイエンスの両方の従来のワークフローに革命を起こす方法を示します。材料イノベーションにおいて、VTE は選択と設計から利用とリサイクルに至るまでのライフサイクル全体を加速し、効率と持続可能性を推進します。ライフサイエン

スでは、VTE は医薬品のライフサイクルを再定義し、検証済みのバーチャルツインと予測モデルを統合して、発見、開発、製造、デリバリーを強化します。これらの例を組み合わせることで、VTE がデータ、モデリング、コラボレーションを統合してイノベーションを促進し、意思決定を改善し、より持続可能で患者中心の未来を実現する方法を示しています。)

## **Evaluating Large Language Models vs. Physics for Antibody Optimization**

(日本語訳：抗体最適化のための大規模言語モデルと物理学の評価

**Anne Goupil-Lamy, BIOVIA**

### **Evaluating Large Language Models vs. Physics for Antibody Optimization**

The application of large language models (LLMs) created a lot of attention, with many models being created for in-silico antibody design, particularly for generating diverse sequence libraries. However, their efficacy in guiding affinity maturation, a process dependent on subtle energetic trade-offs, remains uncertain. We conducted a rigorous head-to-head validation, comparing the predictive power of state-of-the-art LLMs against a physics-based virtual mutagenesis protocol within Discovery Studio. Our study involved introducing a series of mutations into a model antibody-antigen complex, predicting their impact on binding affinity using both computational methodologies, and benchmarking these predictions against experimentally determined values. This work provides a critical, data-driven comparison of these two leading computational paradigms in antibody engineering, offering insights into their respective strengths and weaknesses and paving the way for a more efficient and reliable synergistic workflow for engineering best-in-class antibody therapeutics.

(日本語訳：大規模言語モデル(LLM)の応用は大きな注目を集め、インシリコ抗体設計、特に多様な配列ライブラリを生成するために多くのモデルが作成されました。しかし、微妙なエネルギーのトレードオフに依存するプロセスである親和性成熟を導く上でのそれらの有効性は、依然として不確実です。私たちは、最先端の LLM の予測能力を Discovery Studio 内の物理ベースの仮想突然変異誘発プロ

ロトコルと比較し、厳密な検証を実施しました。私たちの研究では、一連の変異をモデル抗体-抗原複合体に導入し、両方の計算方法論を使用して結合親和性への影響を予測し、これらの予測を実験的に決定された値に対してベンチマークしました。この研究は、抗体工学におけるこれら 2 つの主要な計算パラダイムの重要なデータ駆動型の比較を提供し、それぞれの長所と短所についての洞察を提供し、クラス最高の抗体治療薬を設計するためのより効率的で信頼性の高い相乗効果のあるワークフローへの道を開きます。)

Data Science &  
Informatics

15:10 PM – 15:50 PM

## 全社 **ELN** 導入で加速するカネカの研究 **DX**

D&I

株式会社カネカ

R2B 本部 R2B 戦略室 兼 Discover Planning グループ

幹部職

神田 彰久

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きた。当社はライフサイエンス、高分子、食品等、多様な事業分野を持つため、それぞれに合った利用法の提案が必要である。また、**Pipeline Pilot** を用いたツール開発においても、生成 **AI** や機械学習のライブラリを、いかに多くの部門で共通利用可能な形で組み込むかがポイントとなる。

本日は全社 **ELN** 導入における課題、さらなる生成 **AI** 活用に向けた取り組み、今後の展望について述べる。

16:00 PM – 16:40 PM

## The Logic of Chemical Optimization

(日本語訳：化学的最適化の論理)

D&I

David Kombo, **Sanofi**

### The Logic of Chemical Optimization

During multi-parameter chemical optimization, hits evolve into leads and development candidates with increasing molecular capabilities. We introduce retro-optimization analysis, transforming candidates into simpler leads and hits to understand optimization logic. By mapping a matched molecular pair network, we compared actual optimization routes to theoretical alternatives, identifying differences in lead properties and "optimizons" (key substructures). Expanding this method across multiple projects and datasets, we define optimization logic to guide future discovery campaigns.

(日本語訳：マルチパラメータの化学的最適化中に、ヒットは分子能力が向上したリードおよび開発候補に進化します。レトロ最適化分析を導入し、候補をより単純なリードとヒットに変換して、最適化ロジックを理解します。一致した分子ペアネットワークをマッピングすることにより、実際の最適化ルートを理論的な代替ルートと比較し、リード特性と「最適化子」(主要な部分構造)の違いを特定しました。この手法を複数のプロジェクトやデータセットに拡張することで、将来のディスカバリー・キャンペーンを導く最適化ロジックを定義します。)

## Model-Based Virtual Twins Driving Outcomes through BIOVIA Deep Science

(日本語訳：モデルベースのバーチャルツインが BIOVIA ディープサイエンスを通じて成果を推進する)

Reza Sadeghi, **BIOVIA**

## Model-Based Virtual Twins Driving Outcomes through BIOVIA Deep Science

Model-based Virtual Twins are redefining how science and industry connect data, models, and experimentation to achieve real-world outcomes. By leveraging BIOVIA's deep scientific foundation in molecular modeling, materials science, chemistry, and biology, organizations can move from descriptive analytics toward predictive and generative intelligence. The Virtual Twin provides a continuously learning representation of physical systems—from molecules and formulations to manufacturing processes—built on validated models and experimental data. Through integration with laboratory automation, simulation, and AI-driven analytics, BIOVIA's Virtual Twin framework enables scientists and engineers to explore scenarios, optimize performance, and accelerate innovation while reducing risk and cost.

Combined with machine learning and data connectivity across R&D and manufacturing, they form an intelligent ecosystem that supports faster decision-making and higher success rates. From drug discovery and biologics development to formulated products and sustainable materials, model-based Virtual Twins powered by BIOVIA deep science are driving measurable business and scientific outcomes—transforming experimentation into a continuous cycle of prediction, validation, and improvement across the value chain.

（日本語訳：モデルベースのバーチャルツインは、科学と産業がデータ、モデル、実験を結び付けて現実世界の成果を達成する方法を再定義しています。分子モデリング、材料科学、化学、生物学における BIOVIA の深い科学的基盤を活用することで、組織は記述的分析から予測的および生成的インテリジェンスに移行できます。バーチャルツインは、検証済みのモデルと実験データに基づいて構築された、分子や製剤から製造プロセスに至るまで、物理システムの継続的な学習表現を提供します。BIOVIA のバーチャルツイン フレームワークは、ラボの自動化、シミュレーション、AI 主導の分析との統合を通じて、科学者やエンジニアがリスクとコストを削減しながらシナリオを探索し、パフォーマンスを最適化し、イノベーションを加速できるようにします。

研究開発と製造にわたる機械学習とデータ接続を組み合わせることで、より迅速な意思決定とより高い成功率をサポートするインテリジェントなエコシステムを形成します。創薬や生物製剤の開発から、配合製品や持続可能な材料に至るまで、BIOVIA ディープサイエンスを活用したモデルベースのバーチャルツインは、測定可能なビジネスおよび科学的成果を推進し、実験をバリューチェーン全体の予測、検証、改善の継続的なサイクルに変えています。)

Data Science &  
Informatics

16:50 AM – 17:30 AM

## Pipeline Pilot and Large Language Modules (LLMs) in 2026

D&I

(日本語訳：2026 年の Pipeline Pilot と大規模言語モジュール (LLM) )

Gregory Price, BIOVIA Industry Process Consultant

Large Language Models (LLMs) have recently received significant interest from researchers in chemical and materials science.[1,2] However, using LLMs in scientific pipelines presents a challenge for general models due to the specialized terminology and diverse reporting formats used in scientific domains.

In this work, we demonstrate several approaches for using LLMs within BIOVIA Pipeline Pilot to perform scientific tasks. We show how machine learning approaches can leverage experimental data to support formulation experts. We will also present results using LLMs to extract and parse data stored in the BIOVIA Notebook and BIOVIA Workbook electronic lab notebooks (ELNs). Overall, our findings highlight the potential for LLMs to aid scientists in the extraction and structuring of data and predictive model development.

This talk will also outline some of the recent updates to Pipeline Pilot.

(日本語訳：大規模言語モデル (LLM) は、最近、化学および材料科学の研究者から大きな関心を集めています。[1,2] ただし、科学パイプラインで LLM を使用することは、科学分野で使用される専門用語と多様なレポート形式により、一般的なモデルにとって課題となります。

この研究では、BIOVIA Pipeline Pilot 内で LLM を使用して科学的タスクを実行するためのいくつかのアプローチを示します。機械学習アプローチが実験データを活用して製剤の専門家をサポートする方法を示します。また、LLM を使用して、BIOVIA Notebook および BIOVIA Workbook 電子ラボノート(ELN)に保存されているデータを抽出および解析した結果も発表します。全体として、私たちの調査結果は、LLM が科学者のデータの抽出と構造化、および予測モデルの開発を支援する可能性を強調しています。

ここでは、Pipeline Pilot の最近の更新プログラムの一部についても説明します。)

#### References

[1] Z. Xie, X. Evangelopoulos, Ö. H. Omar, A. Troisi, A. I. Cooper, L. Chen, Fine-tuning GPT-3 for machine learning electronic and functional properties of organic molecules, *Chem Sci* 2023, 15, 500–510.

[2] K. M. Jablonka, P. Schwaller, A. Ortega-Guerrero, B. Smit, Leveraging large language models for predictive chemistry, *Nat Mach Intell* 2024, 6, 161–169

#### Laboratory &

13:15 PM – 13:55 PM

#### Data Management



## BIOVIA Notebook 導入 稼働率 90%以上を実現した取り組み

ロンシール工業株式会社

研究・開発部

グループリーダー

小野 智大

ロンシール工業(株)の研究・開発部ではデジタル化・DX化の一環として 2024 年度に「BIOVIA Notebook」導入した。BIOVIA Notebook ライセンス数に対する稼働率は導入直後から 90%以上の高い稼働率で推移している。本講演では、導入直後から 90%以上の高稼働率を実現した①『イノベーター理論』を活用した導入プロセス、②システム構築・チューニングを中心とした取り組みについて紹介する。『イノベーター理論』とは、新しい製品やサービスが

市場に普及していく過程を、消費者の新しいものを受け入れるタイミングによって 5 つのタイプに分類し、分析するマーケティング理論である。

## Laboratory & Data Management

14:00 PM – 14:40 PM

### 電子実験ノート導入・普及に向けた取り組み

旭化成株式会社

研究・開発本部 基盤技術研究所

技術・開発第二部 DX 推進 Gr

グループ長 エキスパート

武井 祐樹

弊社基盤技術研究所では、「できるだけ情報を残すこと」を目的に、電子実験ノートの導入を進めてきました。しかしながら初期導入時には、導入プロセスや運用面での課題から普及が進まず、一度は失敗を経験しました。現在は、現場の声を丁寧に拾いながら段階的な展開を進めており、まだ取り組みの途中ではありますが、徐々に定着の兆しも見え始めています。本講演では、導入・普及に向けた試行錯誤とその中で得られた学びについてお話しさせていただきます。

## Laboratory & Data Management

15:10 PM – 15:50 PM

### Discoverant and Pharmaceutical Data

(日本語訳：Discoverant および医薬品データ)

Sam Watson, ThermoFisher Scientific

#### Discoverant and Pharmaceutical Data

In the rapidly evolving pharmaceutical industry, the integration and management of shop floor and lab data are critical for ensuring product quality and regulatory compliance. This presentation will explore how ThermoFisher Scientific leverages BIOVIA Discoverant to revolutionize Continuous Process Verification (CPV) and Annual Product Review (APR) report generation. We will delve into the benefits of single-source system builds, emphasizing the seamless integration of data from

**Laboratory Information Management Systems (LIMS) and equipment for Environmental Monitoring.** Additionally, we will discuss how ThermoFisher Scientific, as a Contract Development and Manufacturing Organization (CDMO), enhances client data sharing and validated data transfer services using Discoverant. Finally, we will cover the application of Discoverant in Statistical Process Control (SPC), focusing on golden batch analysis and the potential for product loss prevention and process improvements.

(日本語訳：急速に進化する製薬業界では、製品の品質と規制遵守を確保するために、製造現場とラボのデータの統合と管理が不可欠です。このプレゼンテーションでは、サーモフィッシュャーサイエンティフィックが **BIOVIA Discoverant** を活用して、継続的プロセス検証(CPV)および年次製品レビュー(APR)レポート生成に革命を起こす方法を探ります。単一ソース システム構築の利点を詳しく掘り下げ、検査情報管理システム (LIMS) と環境モニタリング用機器からのデータのシームレスな統合を強調します。さらに、サーモフィッシュャーサイエンティフィックが受託開発製造組織(CDMO)として、**Discoverant** を使用してクライアントデータ共有と検証済みデータ転送サービスをどのように強化するかについて説明します。最後に、ゴールデンバッチ分析と製品損失防止とプロセス改善の可能性に焦点を当てて、統計的プロセス制御(SPC)における **Discoverant** の応用について説明します。

## **Discoverant-to-Discoverant Data Transfer**

(日本語訳：**Discoverant** 間のデータ転送)

### **Abha Ramchandani, Gilead Sciences Discoverant-to-Discoverant Data Transfer**

The presentation outlines the business case when data needs to be migrated from one organization to another, both with a strong implementation of **BIOVIA Discoverant**. Why enter the same data into two different PRIMR templates? This presentation will cover how the data transfer from one Discoverant implementation to the other was automated, its benefits and the technological limitations that must be accounted for.

（日本語訳：このプレゼンテーションでは、BIOVIA Discoverant を強力に実装して、ある組織から別の組織にデータを移行する必要がある場合のビジネスケースの概要を説明します。なぜ同じデータを 2 つの異なる PRIMR テンプレートに入力するか、など解説します。このプレゼンテーションでは、ある Discoverant 実装から別の実装へのデータ転送がどのように自動化されたか、その利点、および考慮しなければならない技術的制限について説明します。

Laboratory &

16:00 PM – 16:40 PM

Data Management



## Solution for Formulated Goods with AI for Food, Beverage, and Cosmetics

（日本語訳：食品・飲料・化粧品の AI による配合商品のソリューション）

Suchaya (Pam) Leelapatranurak  
Manager,  
FoodChain ID

Amit Kulkarni, BIOVIA Industry Process Consult, Senior Director

Gregory Price, BIOVIA Industry Process Consultant

AI and Machine Learning are redefining how food, beverage, and cosmetic companies design and deliver formulated products.

Traditional trial-and-error approaches are giving way to data-driven innovation powered by predictive modeling, scientific AI, and unified lab informatics. Dassault Systèmes' Virtual Twin Experience connects real and virtual labs to accelerate formulation design—optimizing ingredient selection, performance, stability, and sustainability before physical testing. Leveraging advances such as BIOVIA's Chemical Language Model (CLM), which applies large language model (LLM) principles to chemical data, organizations can now capture the “language of formulation” to predict outcomes, uncover novel ingredient combinations, and shorten development cycles. This session highlights how AI-powered formulation and digital continuity are transforming R&D efficiency, compliance, and speed to market—enabling companies to innovate smarter and more sustainably.

(日本語訳：AIと機械学習は、食品、飲料、化粧品企業が配合された製品を設計し、提供する方法を再定義します。従来の試行錯誤のアプローチは、予測モデリング、科学的AI、統合ラボ情報学を活用したデータ駆動型のイノベーションに取って代わられつつあります。ダッソー・システムズのバーチャル・ツイン・エクスペリエンスは、実際のラボと仮想ラボを接続して製剤設計を加速し、物理試験前に成分の選択、性能、安定性、持続可能性を最適化します。大規模言語モデル(LLM)の原則を化学データに適用する BIOVIA の化学言語モデル(CLM)などの進歩を活用することで、組織は「製剤言語」をキャプチャして結果を予測し、新しい成分の組み合わせを発見し、開発サイクルを短縮できるようになりました。このセッションでは、AIを活用した製剤とデジタル継続性が研究開発の効率、コンプライアンス、市場投入までのスピードをどのように変革し、企業がよりスマートで持続可能なイノベーションを行えるようにしているかに焦点を当てます。)

## Laboratory &

16:50 PM – 17:30 PM

## Data Management



### Update of our LAB portfolio 2026 and the journey to a *Connected Science in the Cloud*

(日本語訳：LABポートフォリオ2026のアップデートとクラウドでのコネクテッドサイエンスへの道のり)

Gene Tetreault, **BIOVIA** Roles Portfolio Director

The future of laboratory innovation lies in connection—connecting people, data, and processes across every stage of scientific discovery. In this 40-minute session, we'll explore how our current portfolio is adding functionality based on your input and as well show how BIOVIA ONE Lab and Scientific Notebook come together on the data-centric 3DEXPERIENCE platform cloud to deliver a unified, intelligent laboratory environment.

Attendees will see how experiment design, execution, inventory, registration, and reporting can now flow seamlessly across disciplines—removing the friction between ELN, LIMS, and LES systems. Scientific Notebook becomes the digital workspace for

capturing structured scientific knowledge, while ONE Lab orchestrates the broader workflow, ensuring data continuity and compliance from bench to enterprise.

We'll demonstrate how this integration simplifies day-to-day lab operations, supports regulatory confidence, and opens new possibilities for AI-driven insight, as historical ELN data fuels next-generation predictive models. Discover how connected science on the cloud is transforming the way modern R&D organizations think, work, and innovate.

(日本語訳：ラボのイノベーションの未来は、科学的発見のあらゆる段階で人、データ、プロセスをつなぐ、つながりにあります。この40分間のセッションでは、お客様の意見に基づいて現在のポートフォリオがどのように機能を追加しているかを探るとともに、BIOVIA ONE Lab と Scientific Notebook がデータ中心の3DEXPERIENCE プラットフォーム・クラウド上でどのように連携して、統合されたインテリジェントなラボ環境を提供するかを紹介します。

この講演では実験の設計、実行、在庫管理、登録、レポート作成が分野を超えてシームレスに流れ、ELN、LIMS、およびLES システム間の摩擦を取り除く方法が確認できます。Scientific Notebook は構造化された科学的知識をキャプチャするためのデジタル ワークスペースとなり、ONE Lab はより広範なワークフローを調整し、ベンチから企業までのデータの継続性とコンプライアンスを確保します。

過去の ELN データが次世代の予測モデルを促進する中で、この統合がどのように日常の研究業務を簡素化し、規制当局の信頼をサポートし、AI 主導の洞察の新たな可能性を開くかを示します。クラウド上のコネクテッドサイエンスが、現代の研究開発組織の考え方、作業方法、イノベーションの方法をどのように変革しているかをご覧ください。)