

# BIOVIA USER GROUP MEETING 2024

VIRTUAL TWINによる持続可能な研究開発の実現

2024年11月21日(木)

# AGENDA



**3DEXPERIENCE®**

## 【BIOVIA User Group Meeting 2024 開催のお知らせ】

ダッソーシステムズ・BIOVIAは、11月21日(木)に「BIOVIA User Group Meeting 2024」を東京コンファレンスセンター・品川にて開催いたします。

今年は「Virtual Twinによる持続可能な研究開発の実現」と題して、様々な産業・分野におけるユーザーの皆様のご講演、BIOVIAソリューション最新情報の紹介を予定しております。

午前中のプレナリーセッションでは、基調講演にペロブスカイト太陽電池分野でご活躍されております国立大学法人 東京大学 大学院総合文化研究科 教授 瀬川浩司氏をお迎えします。  
また、BIOVIA CEOとR&DからBIOVIAのビジョン、ソリューションロードマップのご紹介をさせていただきます。

午後からは、分子モデリング&シミュレーション、データサイエンス&インフォマティクス、ラボ&研究情報管理の3つのソリューション領域に分かれて、ユーザー様によるBIOVIAソリューションの運用事例や活用法、日本のスタッフからの最新事例紹介など計15セッションを予定しております。

セッション終了後にはユーザーの皆様同士の交流を深めていただくネットワーキング懇親会を企画しております。  
研究開発DXの最新の動向やトレンドに触れる大変貴重な機会になります。

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 BIOVIA

### 【開催概要】

タイトル	BIOVIA User Group Meeting 2024 ~Virtual Twinによる持続可能な研究開発の実現~
開催日時	2024年11月21日(木) 10:00 - 17:30 (ネットワーキングパーティー 18:00~)
会場	東京コンファレンスセンター品川 5階 東京都港区港南 1-9-36 アレア品川 3F-5F TEL.03-6717-7000
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"><li>・BIOVIAのビジョン・事業戦略</li><li>・R&amp;Dからのソリューションロードマップ紹介</li><li>・基調講演</li><li>・ユーザー様からの事例発表</li><li>・BIOVIA日本スタッフによる事例・ソリューション紹介</li></ul>
対象業界	化学・消費財・材料・素材・自動車・ハイテク・ライフサイエンス業界向けユーザー会

#### 【BIOVIA User Group Meeting 2024 お申込みウェブサイトについて】

以下イベントサイトにアクセスいただき、「今すぐ登録」>「お申し込みフォーム」に必要事項を記入の上、お申込みをお願いいたします。

参加お申込みはこちらから <https://events.3ds.com/ja/biovia-user-group-meeting-2024>

#### 【イベントのみどころ】

・基調講演として東京大学 大学院総合文化研究科 教授 瀬川浩司様より「国産再エネとして期待されるペロブスカイト太陽電池-技術開発の現状と展望」と題してご講演いただきます。

・午後は各ソリューション領域におけるユーザー様ご利用事例発表などを予定しております。

・BIOVIAからは今後のビジョン、グローバルの先端事例や製品ロードマップをご紹介予定です。

詳しくはプログラムをご覧ください。

# BIOVIA User Group Meeting 2024プログラム

プレナリーセッション		
10:00	<p>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</p>	
10:05	<p><b>BIOVIA Vision and Direction</b>                      CEO・R&amp;D Vice President Jason BENEDICT</p>	
10:30	<p><b>R&amp;Dセッション</b>  <b>Connecting Virtual with Real – R&amp;D update for 2025</b>                      Roles Portfolio Director Gene TETREALT                      Data Science Software Engineering Director Dana HONEYCUTT                      Senior Solution Strategy Specialist Stephen TODD</p>	
11:30	<p><b>BIOVIAの展望と事業戦略</b>                      (日本語によるBIOVIA Vision and Direction とConnecting Virtual with Real – R&amp;D update for 2025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</p>	
11:45	<p><b>【基調講演】国産再生エネとして期待されるペロブスカイト太陽電池-技術開発の現状と展望</b>                      国立大学法人 東京大学大学院総合文化研究科 教授                      瀬川 浩司</p>	
12:15	<p>ランチ (3F)</p>	
ブレイクアウトセッション		
Modeling & Simulation	Data Science & Informatics	Laboratory & Data Management
13:30	<p>カネカにおけるELNを基盤としたDX推進                      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</p>	<p>三菱ケミカルのR&amp;Dデジタルインフラ構想と                      電子実験ノート                      三菱ケミカル株式会社                      ファンクショナルエクセレンス本部                      企画部 担当部長                      瀧原 毅</p>
14:10	<p>休憩</p>	
14:20	<p><b>Recent Advances in Chemicals, Materials and Pharmaceutical Simulations</b>                      BIOVIA                      Senior Solution Strategy Specialist Stephen TODD</p>	<p><b>BIOVIA Update on Data Science, Machine Learning, and AI</b>                      BIOVIA                      Data Science Software Engineering Director                      Dana HONEYCUTT</p>
15:00	<p>休憩</p>	
15:10	<p><b>NFG®の自己組織化を標的としたマルチスケール計算</b>                      日産化学株式会社                      物質科学研究所・物質解析研究部 研究員                      浅見 祐也</p>	<p><b>創薬研究のためのデータ活用基盤の構築</b>                      ラクオリア創薬株式会社                      研究開発部門インフォマティクス研究部                      部長 / 名古屋大学 環境医学研究所                      ラクオリア創薬産学協同研究センター                      特任准教授                      森田 幹雄</p>
15:50	<p>休憩</p>	
16:00	<p><b>エポキシ樹脂の硬化過程における不均一構造形成</b>                      九州大学                      次世代接着技術研究センター                      教授・副センター長                      山本 智</p>	<p><b>化学分野における大規模言語モデル(LLM)の適用</b>                      BIOVIA                      インダストリー・プロセス・コンサルタント                      笠井 俊宏</p>
16:40	<p>休憩</p>	
16:50	<p><b>BIOVIA COSMOthermの当社での応用事例</b>                      花王株式会社                      解析科学研究所                      主任研究員                      武田 康助</p>	<p><b>電子実験ノート追加機能開発基盤の構築</b>                      株式会社レゾナック                      計算情報科学研究センター 情報・                      インフォマティクスグループ                      チーフ・リサーチャー                      川原 悠</p>
18:00	<p>原材料を紐づけた配合管理で実現する                      法規制コンプライアンスチェック                      BIOVIA                      インダストリー・プロセス・コンサルタント                      亀井 理恵</p>	
18:00	<p>ネットワーキングパーティー・懇親会</p>	

※プログラムは予告なく変更される場合がございます。ご了承ください。

# BIOVIA User Group Meeting 2024午後の部 : Modeling & Simulation

Modeling & Simulation		
13:30	40min	<p><b>熱硬化性樹脂の硬化反応と熱伝導率計算及び解析</b>            積水化学工業株式会社            R&amp;Dセンター先進技術研究所 情報科学推進センター 副主任技術員            洲上 唯一</p> <p>近年、電気自動車・ハイブリッド車の開発により、パワーモジュールの高性能化・小型化が加速している。それに伴う内部から発生する熱の放熱性が重要となっており、金属を樹脂シートで貼合せた絶縁樹脂基板がキー材料となっている。そこで、樹脂の放熱性をシミュレーションによって評価・設計に活用することを目的とし、BIOVIA Materials Studioを用いた全原子型分子動力学シミュレーションによる熱硬化性樹脂の硬化反応と熱伝導計算を実施し、その結果を解析することで高熱伝導な樹脂設計のための指針探索を行った。本講演では上記の実施内容について述べる。</p>
14:20	40min	<p><b>Recent Advances in Chemicals, Materials and Pharmaceutical Simulations</b>            BIOVIA            Senior Solution Strategy Specialist            Stephen TODD</p> <p>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.</p>
15:10	40min	<p><b>NFG®の自己組織化を標的としたマルチスケール計算</b>            日産化学株式会社            物質科学研究所・物質解析研究部 研究員            浅見 祐也</p> <p>近年、計算機性能の向上やパソコン利用の促進に伴い、企業における計算科学の重要性が高まっている。最近弊社でもこのようなニーズに答えるため、Materials Studioを導入して材料系の構造・物性計算をマルチスケールで行う技術構築を進めてきた。本講演では弊社がヘアケアおよびスキンケア用途で販売しているNFG®の主な有効成分であるパルミトイルジペプチド-18(PD-18)に着目し、このPD-18が示す特異な自己組織化過程を粗視化分子動力学計算を用いて追跡した結果をご紹介します。また実験値を再現する粗視化条件と粗視化から全原子へのリバースマッピングを利用することで、膜レベルの分光実験の結果を再現する計算結果が得られることをご紹介します。</p>
16:00	40min	<p><b>エポキシ樹脂の硬化過程における不均一構造形成</b>            九州大学            次世代接着技術研究センター 教授・副センター長            山本 智</p> <p>エポキシ樹脂は、主剤と硬化剤の反応により三次元ネットワーク構造を形成して硬化し、接着剤や構造材料として広く用いられている。エポキシ樹脂の硬化過程における不均一構造形成と硬化物の物性を分子スケールで理解することを目的に行った全原子および粗視化分子動力学計算について紹介する。</p>
	40min	<p><b>BIOVIA COSMOthermの当社での応用事例</b>            花王株式会社            解析科学研究所 主任研究員            武田 康助</p> <p>BIOVIA COSMOthermはソフトマテリアルの吸着や相溶に係る物理量を高い精度でなおかつ効率よく求められるソフトウェアである。本講演では固液界面での高分子の吸着現象、ならびに樹脂中でのセルロースナノファイバーの分散技術に応用した事例を紹介する。</p>

# BIOVIA User Group Meeting 2024午後の部 : Data Science & Informatics

Data Science & Informatics		
13:30	40min	<p><b>カネカにおけるELNを基盤としたDX推進</b> 株式会社カネカ R2 B本部 R2 B戦略室 兼 Discover Planning グループ 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の導入を段階的に行っている。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、それぞれにあった利用法の提案と合わせ、共通利用可能なPipeline Pilotのツール開発、DX人材教育を並行して進めている。</p>
14:20	40min	<p><b>BIOVIA Update on Data Science, Machine Learning, and AI</b> BIOVIA Data Science Software Engineering Director Dana HONEYCUTT</p> <p><i>New machine learning (ML) and AI methods, especially deep learning (DL), are revolutionizing data science for both general and scientific applications. Yet scientists are often faced with cleaning and analyzing relatively small and domain-specific data sets for which DL methods might not be appropriate. Thus, the need remains for classic data science and ML methods accessible to non-specialists. This presentation covers recent BIOVIA developments using both DL and other data science approaches applied to scientific problems. Topics include AI-based retrosynthetic analysis, LLMs enhanced with BIOVIA or proprietary data to apply to scientific problems, and democratized creation and application of ML models.</i></p>
15:10	40min	<p><b>創薬研究のためのデータ活用基盤の構築</b> ラクオリア創薬株式会社 研究開発部門インフォマティクス研究部部長 / 名古屋大学 環境医学研究所ラクオリア創薬産学協同研究センター 特任准教授 森田 幹雄</p> <p>創薬研究で扱うデータは大規模化かつ多様化の一途をたどっており、必要なデータや情報を効率よく取得/集積/解析/可視化することは研究推進に直結する極めて重要な課題である。この課題に対して、効率化に加えて持続性・発展性も考慮しながら、Pipeline Pilotを中心とするデータ活用基盤の構築を進めてきた。本発表では我々のいくつかの取り組みについて紹介したい。</p>
16:00	40min	<p><b>化学分野における大規模言語モデル(LLM)の適用</b> BIOVIA インダストリー・プロセス・コンサルタント 笠井 俊宏</p> <p>大規模言語モデル(LLM)は、近年、本来の適応領域である自然言語の領域を超え、画像や音声の生成やコンピューター操作の自動化等で社会実装が積極的に進められています。同時に、化学領域においても”生成する”というLLMの能力を研究開発に活かす挑戦が続けられています。このセッションでは、LLMの化学領域における適用事例とBIOVIA製品による実装例、そして従来の手法と比較した場合の長所と短所についてご紹介致します。</p>
13:30	40min	<p><b>電子実験ノート追加機能開発基盤の構築</b> 株式会社レゾナック 計算情報科学研究センター 情報・インフォマティクスグループ チーフ・リサーチャー 川原 悠</p> <p>レゾナックは2019年から、社内資産である研究開発記録の「蓄積」「共有」「活用」を目的にBIOVIA Notebookを導入し全社的な普及に取り組んできた。当社は有機・無機・金属にわたる多様な事業を展開しておりそれぞれに適した電子実験ノートの機能が求められている。これまで、各現場での導入支援や追加機能開発を行い、利用者満足度の向上に努めてきた。従来の追加機能開発には主にBIOVIA Pipeline Pilotを使用していたが、近年ではBIOVIA NotebookのREST APIを活用している。さらに、Microsoft Azureなどのクラウドサービスと連携し、保守性の高い機能開発基盤を構築した。本講演では、BIOVIA Notebookの拡張性を活用した開発基盤構築の具体的な事例を紹介する。</p>

# BIOVIA User Group Meeting 2024午後の部 : Laboratory & Data Management

Laboratory & Data Management		
13:30	40min	<p><b>三菱ケミカルのR&amp;Dデジタルインフラ構想と電子実験ノート</b> 三菱ケミカル株式会社 ファンクショナルエクセレンス本部 企画部 担当部長 瀧原 毅</p> <p>三菱ケミカルは2017年4月に三菱系素材3社、更に日本化成、日本合成化学を統合して現在に至る会社である。多岐に亘る製品や技術は相乗効果が期待できる一方、沿革に由来して研究開発拠点が点在しており、異なる知を結び付け価値創出に繋げるか、ヴァーチャルなOne R&amp;Dというコンセプトからデジタルインフラの整備を行ってきた。電子実験ノートはその一翼であり、導入効果や課題等を発表する。</p>
14:20	40min	<p><b>Deep dive on the connectivity of Virtual to Real</b> BIOVIA Roles Portfolio Director Gene TETREAUULT</p> <p>BIOVIA, a pioneer in machine learning, modeling, simulation, and laboratory informatics, has a unique opportunity to revolutionize research and development by combining the power of virtual and real-world data. This presentation will explore how BIOVIA's comprehensive suite of tools can bridge the gap between theoretical models and experimental results, enabling researchers to:</p> <p>Accelerate discovery: By leveraging advanced simulations to predict the behavior of complex systems and identify promising candidates for further investigation.</p> <p>Optimize experiments: By integrating real-time data from laboratory instruments with predictive models to refine experimental designs and reduce costs.</p> <p>Enhance decision-making: By providing a holistic view of both virtual and real-world data, supporting informed decisions throughout the research process.</p> <p>This presentation will cover specific examples of how BIOVIA's solutions are being used to address critical challenges in various industries, including life sciences, materials science, and chemistry. By understanding the combined value of virtual and real data, researchers can unlock new possibilities and drive innovation.</p>
15:10	40min	<p><b>企業事例発表決定</b></p> <p>講演詳細近日公開</p>
16:00	40min	<p><b>キリンホールディングス株式会社における電子実験ノートの導入及びその効果と影響について</b> キリンホールディングス株式会社 キリン中央研究所 主査/主務 篠原 裕之</p> <p>キリンホールディングス株式会社では研究公正の担保と将来的な研究データ活用に向けたデータ基盤構築を目的にBIOVIA Notebookの導入を進めている。食から医にわたる多様な研究を進めイノベーション創出を目指す中で、BIOVIA Notebookを選定した理由、定着施策、導入後の変化や現状を紹介したい。</p>
16:50	40min	<p><b>原材料を紐づけた配合管理で実現する法規制コンプライアンスチェック</b> 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>グローバル展開を見据える企業が増える昨今、研究所では海外向けの配合設計を行う際に、製品のクオリティとともに法規制コンプライアンスのチェックに多大な労力を割くことが増えています。そのような中、2024年10月にBIOVIAから新たに法規制コンプライアンスチェックのアプリケーションがリリースされました。今後は、原材料を紐づけた配合設計、それらの試作試験と結果入力、これらのデータの活用を目指した各アプリケーションとの連携も予定されています。今回は現在搭載されている法規制コンプライアンスチェックの機能と、今後の展開をご紹介します。</p>