

BIOVIA USER GROUP MEETING 2021
~ Material Science Day

2021年11月10日(水)

AGENDA



3DEXPERIENCE®

【BIOVIA User Group Meeting 開催のお知らせ】

BIOVIA は 2021 年 11 月 10 日(水)・11 日(木)に「BIOVIA User Group Meeting 2021」をオンラインにて開催いたします。

科学的知見をさらに深め、次世代に向けてより良い未来を創るために新薬・新素材の開発を進めるべく、今年度は「人と科学が共生する未来を創るために」をテーマに掲げ、BIOVIA の今後の展望や最新の製品情報及びソリューション、BIOVIA 製品をご活用いただいております国内外のユーザー様による活用事例をお届けいたします。

昨今、材料イノベーションやラボラトリー・インフォマティクス、データサイエンス、製品の品質管理の重要性がますます高まっています。

BIOVIA は、科学を主とする研究、製品開発、品質管理、製造の各ステージにおいて、製品開発の加速化、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するためのソリューションなど、多彩なアプリケーションを取り揃えております。本イベントで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申し上げております。

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 2021 ~Material Science Day
会期	2021 年 11 月 10 日(水) 10:00 - 15:55
形式	オンライン(ライブ配信)
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 ブランドからのアップデート• 製品アップデート• 技術動向• 基調講演• ユーザー様からの事例発表• パートナー様のソリューション紹介(ランチタイム)
対象業界	11 月 10 日(水): “化学・エネルギー、一般消費財、自動車、ハイテク、産業機械” 業界 11 月 11 日(木): “ライフサイエンス” 業界
対象商品	Discovery Studio, Materials Studio, Pipeline Pilot, Electronic Lab Notebook, Discoverant, QUMAS, BIOVIA Registration, BIOVIA Insight など(予定)

【みどころ】

- 日本国内外のユーザー様からの発表*
- 今後の BIOVIA の展望や製品ロードマップを日本語字幕を付けてご紹介

【ご注意事項】

- 本イベントは 2 日間 LIVE での配信を予定しております。日本人のユーザー様からのお講演は本イベントのみの配信で、後日オンデマンドでの配信はございません。
ご聴講されたいお客様は、ぜひこの機会をお見逃しのないようご参加ください。
- 本イベントの録画・録音・スクリーンショット等は、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。
- ネットワーク環境が安定した場所よりご参加ください。ご聴講されたいお客様は、ぜひこの機会をお見逃しのないようご参加ください。

【お申込み】

- 2021 年 11 月 10 日(水) Material Science Day: <https://events.3ds.com/ja/biovia-user-group-meeting-material-science-day>
- 2021 年 11 月 11 日(木) Life Science Day: <https://events.3ds.com/ja/biovia-user-group-meeting-life-science-day>

11月10日(水) Material Science Day

Time	Dularion	Content
全体セッション		
10:00 - 10:10	10 min	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
10:10 - 10:30	20 min	BIOVIA Update (2022年の展望) (日本語字幕) Dassault Systemes BIOVIA Brand CEO Jason Benedict Dassault Systemes BIOVIA Strategy Vice President Reza Sadeghi
10:30 - 11:20	50 min	BIOVIA 製品 Road map & Update (What's new 2022) (日本語字幕) Dassault Systemes BIOVIA Material Science R&D Team
11:20 - 11:50	30 min	基調講演：超大規模計算によるパラダイムシフト 東北大学 金属材料研究所 計算材料科学研究部門 教授 計算材料科学センター センター長 久保 百司氏 持続可能な社会を構築するためには、燃料電池、リチウムイオン電池、触媒、トライボロジー、構造材料、エレクトロニクスなどの多様な研究分野において、元素に頼らない材料設計が強く求められている。そこで、我々はスーパー・コンピュータ "MASAMUNE-IMR" 上において、化学反応を考慮しながら1億原子以上の超大規模分子動力学計算を実現することによって、ナノスケールの元素の設計に加えて、メゾ・マクロスケールの構造設計をも可能とするパラダイムシフトを実現した。本講演では、燃料電池、トライボロジー、構造材料など多様な系への超大規模計算による材料設計の成功例について紹介する。
11:50 - 13:00	1 h 10 min	ランチ
Materials Studio ユーザー様向けセッション		
13:00 - 13:25	25 min	第一原理計算を用いた無機材料の検討の紹介 AGC 株式会社 先端基盤研究所共通基盤技術部ソフトサイエンスチーム サブリーダー 今村 穣氏 我々は、Materials Studio の CASTEP を用いて、触媒表面、ガラス、固体電解質など多岐にわたる無機材料の検討を行ってきた。本講演ではガラス表面における O2p の軌道エネルギーの見積もりを行い、実験結果と矛盾しない結果を得たことを中心に報告する。
13:25 - 13:50	25 min	マルチスケール・シミュレーションを活用した次世代タイヤ材料の開発 住友ゴム工業株式会社 研究開発本部 主任 図師 知文氏 持続可能なモビリティ社会の実現に向けて、地球環境に配慮し性能持続に優れた次世代タイヤ材料の開発が強く求められている。新規タイヤ材料を効率的に開発するためには、実験的アプローチが困難である材料の複雑な物理的・化学的相互作用を理解し、それらのタイヤ性能への影響を明らかにする必要がある。当社はこれまで、分子シミュレーション技術を駆使することにより、原子・分子レベルで材料の機能発現メカニズムを明らかにし、新規タイヤ材料の設計開発を実現してきた。本発表ではそれらの取り組みの中から、量子化学計算や分子動力学シミュレーションを実際のタイヤ製品の材料開発に適応した事例を紹介する。



11月10日(水) Material Science Day

電子実験ノートユーザー様向けセッション

		Huntsman における電子実験ノートの導入事例 (日本語字幕) Huntsman Innovation Operations Manager Florian Klunker 氏
14:00 - 14:20	20 min	<p>Huntsman は、数えきれないほど多様な、日用品および工業製品に使われている化学薬品を製造する世界有数の化学メーカーである。Huntsman の従業員は、生活を豊にするためのイノベーションを生み出すという共通のゴールに向かって一致団結している。電子実験ノート (ELN) の導入により、お客様により良いサービスを提供するために、迅速かつ効果的に革新を起こすことを目指している。Huntsman のイノベーション・プロセスに沿った ELN のビジョンを実現するために、次のツールを選択した。:</p> <ul style="list-style-type: none"> - 合成実験および製剤実験を記録するための BIOVIA Workbook - 試薬管理システムとしての BIOVIA CISPro - 構造化データ取得と分析の為の追加モジュール <p>本セッションでは、着想から段階的な実装までの主要なステップについて紹介。各ステップには、ベンダー選択へのアプローチ、概念実証の定義、サポートサービスモデルの定義、第1フェーズの導入が含まれる。このフレームワークでは、そのような実装の複雑さと潜在的な落とし穴について取り上げる。Huntsman での ELN の導入は、4つの事業部門にわたる約 750 人のユーザーの要件をカバーしている。全ての主要部門が関わる強固なプロジェクト管理の必要性と、適切な構造とワークフローを確立するにあたっての各領域の専門家との間の明確なコミュニケーションの必要性が強調されている。さらに、不確実性とリスクを軽減するために選択された戦略、アジャイル開発についても説明する。</p>
14:20 - 14:40	20 min	<p>Dow における BIOVIA 電子実験ノートの導入：ドキュメント、データリポジトリ、およびハイスクループットワークフローとの統合 (日本語字幕) Dow Core R&D Chemical Science, Research Scientist Todd Seneca 氏</p> <p>2014 年に紙から電子のノートブックに移行して以来、Dow では 2,700 人以上の研究者が電子実験ノート (ELN) システムである BIOVIA Notebook を使用している。本セッションでは、触媒合成の実験手順と特性データの文書化から、ハイスクループットワークフローと製品の特性評価の Pipeline Pilot による連携まで、Dow が研究所のデジタル化を促進するために BIOVIA Notebook をどのように導入したかについて詳しく紹介する。</p>
14:40 - 14:50	10 min	休憩
COSMOtherm・Material Informatics ユーザー様向けセッション		
14:50 - 15:15	25 min	<p>精密機器メーカーにおける量子化学計算および熱物性推算の使用例 セイコーエプソン株式会社 分析 CAE センター エキスパート 宮澤 弘氏</p> <p>TURBOMOLE の使用例として、①インク色材の色ずれに対して、UV-vis スペクトラム計算を用いて解析した内容、および、②インク定着樹脂の合成において、ウレタン反応の反応障壁エネルギーを計算して考察した事例を紹介する。次に COSMOtherm の使用例として、③接着剤樹脂中におけるモノマー分子の侵入劣化特性についての考察、および、④繊維における色材の染色特性に関する考察について紹介する。</p>
15:15 - 15:30	15 min	<p>シミュレーションの民主化 (日本語字幕) Dassault Systemes BIOVIA Material Sciences Portfolio BIOVIA Roles Portfolio Director Julian Willmott</p> <p>Dassault Systemes BIOVIA Global Technical Sales BIOVIA Industry Process Consultant Senior Manager Abhijit Chattopadhyay</p> <p>「Virtual Lab」は、モデリングの経験がほとんどまたはまったくない科学者がシミュレーションを実行して、日常の研究問題の解決策を見つけることができる場所です。BIOVIA の Julian WILLMOTT と Abhijit Chattopadhyay より、当ソフトウェアについて紹介する。</p>
全体セッション		
15:30 - 15:40	10 min	<p>Q&A ※ユーザー様セッションへのご質問につきましては、後日ご回答いたします。</p>
15:40 - 15:55	15 min	<p>クロージング 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>

* 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