

第35期 CAMM

Computer Aided Materials and Molecular Design Forum

コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会

2021年10月1日(金) スタート
新規メンバー募集・体験参加受付中

産・官・学の枠を越え、異業種・異分野が集う 『使える計算科学』実現のための横断的共同研究組織

コンピュータを使って物質を予測・設計する「計算科学」は、「理論」「実験」に次ぐ第三の科学技術として更なる重要性を増していますが、現実の材料開発・物質設計に結実させるには、「モノづくり」に発展させる研究者としてのセンスも問われています。CAMMフォーラムは国内の計算科学の歴史と歩みを共にするべく1987年に発足、産・官・学の第一線研究者の協力支援のもとに共同研究・情報交換・人材育成の場として発展して参りました。学問領域や組織を越えての多彩な人材による知恵・情報・意見の交流は、『使える計算科学』実現のためのアイデアとノウハウを掴む貴重なきっかけになります。計算科学や材料開発・材料設計に興味をお持ちの、熱意ある研究者のご参加をお待ちしております。

*計算科学初心者も歓迎です。

第1回例会 オープンフォーラム

日時:2021年10月1日(金) / 開催方法:オンライン(Zoom)

* 入会検討中の方は、無料にて体験参加を承ります *

10:00-12:00 【分科会】今年期間研究テーマの設定 ※参加自由、新メンバーのご提案も大歓迎
13:15-17:00 【本例会】基調講演・オリエンテーション

《基調講演》

「計算化学を使って有用な天然物を探索する ～電子状態インフォマティクスによる挑戦」

熊本大学大学院先端科学研究部 准教授 杉本 学 氏

天然物系の抗菌剤や抗癌剤について電子状態計算と機械学習を使ってやっているが、天然物から医薬品や農薬、化粧品だけでなく、半導体材料や発光材料ができれば面白いな、という気持ちもあってやっている。chemical space の違いも面白いし、合成可能性の問題は(とりあえず)解決できるので、面白がってやっている。最近「ものとり」と呼ばれる天然物化学者との交流もすこし広がってきた。アンモニアや水素製造の触媒に関する研究もやっていて、医薬品関係とエネルギー関係だけが社会のお役に立てる計算科学(化学)を心掛けている。その意味で、今回 CAMM フォーラムで講演させていただいて大変ありがたい限りである。

●開催概要

◆期間：2021年10月1日(金)～2022年9月4日(金) 全12回(通常例会10回、合宿研究会2回)

10月	2021/10/1(金)	2月	2022/2/4(金)	6月	2022/6/3(金)
11月	2021/11/5(金)	3月	2022/3/4(金)	7月	2022/7/7(木)～8(金)あるいは7/8(金)のみ
12月	2021/12/3(金)	4月	2022/4/1(金)あるいは8日(金)	8月	2022/8/5(金)
1月	2022/1/7(金)	5月	2022/5/13(金)	9月	2022/9/2(金)

8月、9月は日程変更の可能性もあります

◆例会会場：都内会議室あるいはオンライン(Zoom)開催

◆参加対象：計算科学・材料開発に携わる研究開発担当者・マネージャー ※役職、計算科学の経験は問いません

●例会の構成

《分科会 2時間 (10:00～12:00)》

※参加自由、計算科学初心者歓迎

メンバー自主運営による分科会を毎例会の午前中に開催。成果は出版や学会などで積極的に公開しています。

前期分科会研究テーマ

■計算物理分科会■

参加メンバー

電力中央研究所、太陽誘電、京セラ
ノリタケカンパニーリミテド、産総研
モルシス、日本大学、住友金属鉱山、
計算科学振興財団、倉敷紡績、東ソー、
住友化学、日本ケミコン、ENEOS、
アーク・イノベーション、クロスアビリティ
ダイキン、ダッソー・システムズ、JST

- ・MMI (みんなでマテリアルズ・インフォマティクス)
 - ・物性計算 (Shining MI プロジェクト、
MD プログラムを使った有限要素法)
 - ・コンピュータ技術(富岳、GPU、VPU など)
 - ・量子コンピュータ
(量子機械学習の紹介、プログラミングなど)
 - ・材料数学/圏論と材料設計
 - ・その他(論文紹介、失敗事例紹介など)
- …など

■計算化学応用分科会■

参加メンバー

クレハ、DIC、コンプレックス
産総研、ダイキン工業、東芝
ブリヂストン、リコー、住友ゴム
日産化学、大阪ガスケミカル

- ・JupyterLab をツールにした
計算化学ソフトの使用手順の作成
- ・DMRG-CASSCF で大規模活性空間計算
- ・合成ルート探索ツール
- ・Python による MI と計算化学の組み合わせ

■計算化学機能比較分科会■

参加メンバー

ADEKA、関西ペイント、ブリヂストン
クロスアビリティ、コニカミノルタ
システム計画研究所、横浜ゴム
クレハ、ナミックス、三井化学、東レ

- ・機械学習
分子発生
錯体の MI
機械学習モデルを読めるようにする
結果の可視化、データの前処理(ノイズ処理など)
- ・反応予測
反応経路予測、反応点予測
IBM RXN(反応予測)活用
- ・その他
パーシステントホモロジー試行
量子コンピュータの現状調査

※研究テーマは新メンバーの意見も取り入れながら、毎年10月に新たに決定します。

受賞

計算物理分科会での10年間の成果、2001年度 日本化学プログラム交換機構(JCPE)優秀プログラム賞受賞

第一原理分子動力学汎用プログラム「CAMP-Atami」

14社15名による企業や組織の枠を越えての横断的研究組織は、基礎研究のプログラム開発において非常にユニークである点も評価されました。

出版

計算化学応用分科会21社22名による3年間の成果

「分子軌道法で見る有機反応-MOPAC演習」を丸善より出版(1997年)

監修：堀 憲次氏・田辺和俊氏
大学の参考書などに活用され、現在までに1,000冊以上販売されています。

発表

2014年10月16日(木) / 於:東京・タワーホール船堀

日本化学会秋季事業 第4回CSJ化学フェスタ「フェスタ企画一使える理論・情報・計算化学」にて

『CAMMフォーラムの取り組み ～ 所属の枠を超えた課題解決ネットワーク ～』を発表

《本例会 3時間 (13:15～16:30)》

計算物理、計算化学、計算バイオ各分野から多彩なゲストを毎回招聘し、また各参加企業の計算科学の実情を紹介しあい「シミュレーション」だけに終わらぬ、モノづくり直結した計算科学を実践するヒントを掴みます。 ※前期ゲストは右頁ご参照 ➡

《合宿例会 一泊二日 年1回(7月)》 ※新型コロナ感染症の状況によって変更があります

- ・分科会の時間を通常例会より多くとり(約10時間)、研究のより一層の推進を図る
- ・パネルディスカッションや特別講演で幅広い知識や情報を吸収し、
メンバー相互の本音に基づいた意見交換を行い、交流と親睦を深める

(1)メンバー各人には、プログラム・マニュアルなど情報を提供、共有の財産として利用することができます。

(2)活動報告、トピックス、会員情報などを機関誌「CAMM NEWS」として編集・発行しています。

(3)専用ウェブサイト: <http://www.cammbri.or.jp/camm/>より、例会情報や配布資料のダウンロードができます。

●研究指導協力体制

幹 事	高田 章 氏	元 AGC(株)	中央研究所共通基盤センター 主席研究員	
	小口 多美夫 氏	大阪大学	スピントロニクス学術連携研究教育センター デザイン系部門長/特任教授	
	伊藤 聡 氏	科学科学振興財団	技術顧問	
	菊池 真美 氏	(株)クレハ	CSR 部副部長(前・医薬品事業開発部長)	
	長嶋 雲兵 氏	横浜市立大学大学院	ナノバイオサイエンス科学研究科 客員教授	
	松宮 徹 氏	大阪電気通信大学	監事(元 新日本製鐵(株) フェロー)	
	石田 雅也 氏	住友化学(株)	先端材料開発研究所 技術室 兼 デジタル革新部	
	大沼 敏治 氏	電力中央研究所	材料科学研究所 材料モデリンググループ 主任研究員	
	研究企画協力委員	田子 精男 氏	元 金沢大学 大学院	自然科学研究科 教授
		田辺 和俊 氏	元(独)産業技術総合研究所	計算科学研究部門 総括研究員
北村 一泰 氏		摂南大学	薬学部 客員教授 (元 大正製薬 取締役医薬研究開発担当)	
中馬 寛 氏		徳島大学	名誉教授	
本田 隆 氏		日本ゼオン(株)	総合開発センター 基盤技術研究室	
大西 楷平 氏		元 日本電気(株)	基礎・環境研究所 フェロー	
善甫 康成 氏		法政大学	情報科学部 デジタルメディア学科情報科学研究科 教授	
中村 振一郎 氏		理化学研究所	イノベーション推進センター 中村特別研究室室長	
研究会顧問	堂山 昌男 氏	東京大学	名誉教授	

●前期(第34期 2020年10月~2021年9月)本例会 研究経過

10月	■インフォマティクスを実践するには何が必要か ◆オリエンテーション	船津 公人 氏 [東京大学 大学院 工学系研究科 化学システム工学専攻 教授]
11月	■「転移現象とスケーリング:切り紙の伸長から滴の融合・分離まで」 ■「最近の研究から:粒子法を用いた電子状態計算」	奥村 剛 氏 [お茶の水女子大学 理学部物理学科 教授] 善甫 康成 氏 [法政大学 情報科学部デジタルメディア学科 教授]
12月	■「ガラス浮遊炉で作る新規ガラスの物性と構造」	井上 博之 氏 [東京大学 生産技術研究所 物質・環境系部門 教授]
1月	■「1000 Spiders Project: クモ糸の高機能発現メカニズム解明に向けたクモ類網羅的シーケンシング」 ■「やってみて理解したシミュレーション協働教育」	荒川 和晴 氏 [慶應義塾大学 先端生命科学研究所 環境情報学部 准教授] 前園 涼 氏 [北陸先端科学技術大学院大学 情報科学系 教授]
2月	■「量子液体の計算理論」 ■「第一原理計算を利用した構造用金属材料の研究開発例」	三浦 伸一 氏 [金沢大学 理工研究域数物科学系 教授] 山口 正剛 氏 [日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター]
3月	■「液体の積分方程式理論を基盤としたマルチスケール法の構築と応用」 ■「(続)計算材料科学のための擬ポテンシャルデータベースとその実践例」	吉田 紀生 氏 [九州大学 大学院理学研究院化学部門 准教授] 小林 一昭 氏 [物質・材料研究機構 国際ナノアーキテクトニクス研究拠点(MANA) ナノセオリー分野 ナノ計算材料科学グループ 主幹研究員]
4月	■メンバー企業紹介 ~メンバー企業3社 ■「陽電子消滅を用いた材料の欠陥,自由体積の検出」	上殿 明良 氏 [筑波大学 数理物質系 教授]
5月	■「構造ベース創薬基盤技術の研究開発とその応用~核内受容体リガンド、COVID-19治療薬のドラッグデザイン」 ■「微粒子分散系の直接数値計算」	辻 一徳 氏 [分子機能研究所 代表] 山本 量一 氏 [京都大学 大学院 工学研究科 教授]
6月	■「マルチスケールモデリング・シミュレーションによる材料強度の予測と設計」 ■「最近の研究から」	尾方 成信 氏 [大阪大学 大学院 基礎工学研究科 教授] 墨 智成 氏 [岡山大学 異分野基礎科学研究所 准教授]
7月	■「第一原理計算の前と後」	小口 多美夫 氏 [大阪大学 基礎工学研究科 附属スピントロニクスセンター学術連携研究教育センター 特任教授]
8月	■メンバー企業紹介 ~メンバー企業3社 ■「最近の研究から」	多々良 源 氏 [理化学研究所 創発物性科学研究センター 量子情報エレクトロニクス部門スピノ物性理論研究チーム チームリーダー]
9月	■分科会年間活動報告会	

前期(第34期)参加メンバー

※順不同・敬称略

元 AGC(株)	(中央研究所主幹研究員)	高田 章	コンフレックス(株)	代表取締役社長	大田 一男
大阪大学	スピントロニクス学術連携研究教育センター デザイン系部門長/特任教授	小口多美夫	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 上級主任研究員	宮本 良之
(株)クレハ	CSR 部副部長 (前・医薬品事業開発部長)	菊池 真美	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター	石田 豊和
横浜市立大学大学院	ナノバイオサイエンス科学研究科 客員教授	長嶋 雲兵	(株)システム計画研究所	事業本部第2セグメント エキスパート	山本 真司
元 新日本製鐵(株)	(技術開発本部フェロー)	松宮 徹	住友化学 (株)	デジタル革新部 R&Dデータ科学チーム	西野 信也
住友化学(株)	先端材料開発研究所 技術室 兼 デジタル革新部	石田 雅也	住友金属鉱山(株)	技術本部数理解析技術部 CAE グループ	西原 泰孝
電力中央研究所	材料科学研究所 材料モデリンググループ主任研究員	大沼 敏治	住友ゴム工業(株)	研究開発本部分析センター	竹内 宗孝
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	ダイキン工業(株)	テクノロジー・イノベーションセンター	大森 遼
元 金沢大学	(大学院自然科学研究科教授)	田子 精男	ダイキン工業(株)	テクノロジー・イノベーションセンター	三戸 愛織
元 (独)産業技術総合研究所	(計算科学研究部門総括研究員)	田辺 和俊	太陽誘電(株)	R&D センター材料開発部	岩崎誉志紀
徳島大学	名誉教授	中馬 寛	ダッソー・システムズ(株)	BIOVIA 事業部 ソリューション サイエンティスト	桑原 理一
日本ゼオン(株)	総合開発センター基盤技術研究室	本田 隆	DIC(株)	総合研究所基盤技術研究センター 計算科学研究室	立川 豊
元 日本電気(株)	(基礎・環境研究所フェロー)	大西 檜平	電力中央研究所	材料科学研究所材料モデリンググループ	別役 潔
法政大学	情報科学部デジタルメディア学科 情報科学研究科教授	善甫 康成	(株)東芝	研究開発センター有機材料ラボラトリー 研究主務	吉田 孝史
理化学研究所	イノベーション推進センター 中村特別研究室室長	中村振一郎	東ソー(株)	アドバンストマテリアル研究所 主任研究員	秋池 良
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	東レ(株)	先端材料研究所 主席研究員	茂本 勇
(株)アーク・イノベーション	ディレクター	檜貝 信一	ナミックス(株)	技術開発本部 開発グループ 要素技術チーム	新井 史紀
ADEKA(株)	研究企画部 研究企画室	遠山 薫樹	日産化学(株)	物質科学研究所物質解析研究部 計算科学グループ主査	石川 誠
ENEOS(株)	機能材カンパニー機能材研究開発部 機能材生産技術グループ	鶴田 祐二	日本ケミコン(株)	研究開発本部基礎研究センター 先端材料グループ 主任研究員	花輪 洋宇
大阪ガスケミカル(株)	フロンティア マテリアル研究所 執行役員 所長	藤原 和弘	日本大学	医学部一般教育系化学分野 准教授	小松徳太郎
関西ペイント(株)	R&D 本部基礎研究所第2研究部	長野 千尋	(株)リタケカンパニーリミテド	開発・技術本部研究開発センター 粉体デザイングループ 参事	鈴木 毅裕
京セラ(株)	先進マテリアルデバイス研究所 基盤技術研究部	田中 政博	(株)ブリヂストン	デジタルエンジニアリング本部シミュレーション技術研究部 材料シミュレーション技術研究ユニット	佐藤 弘一
倉敷紡績(株)	技術研究所基盤技術グループ研究員	南條 祐子	(株)ブリヂストン	デジタルエンジニアリング本部シミュレーション技術研究部 材料シミュレーション技術研究ユニット	大熊 孝広
(株)クレハ	デジタル化推進プロジェクト 技術・製造グループ	稲葉 祐策	三井化学(株)	研究開発本部生産技術研究所 先端解析グループ 研究員	松本健太郎
(株)クロスアビリティ	計算科学事業部	日野 理	(株)モルシス	マテリアルサイエンス部長	千葉 貢治
(株)クロスアビリティ	リサーチフェロー	石村 和也	横浜ゴム(株)	研究本部 小石研究室	古渡 直哉
計算科学振興財団	CTO 共用専門員 研究部門主任研究員	西川 武志	(株)リコー	先端技術研究所共通基盤センター 第二解析技術室材料特性解析グループ	左部 顕芳
コニカミノルタ(株)	開発統括本部 要素技術開発センター 価値創造室	蝦名 昌徳			

参加要領

※事業コード210029

＜体験参加について＞ 第1回例会(10/15)は、入会を検討中の方にも無料でご参加いただけます。

- ◆参加料 : 1名につき 正会員 297,000円(本体価格 270,000円) 一般 330,000円(本体価格 300,000円)
 - ・合宿参加費(1回につき3万円~3万5千円程度)や特別懇親会費などは別途実費を申し受けます。
 - ・分割払いなども承ります。お気軽にご相談ください。
 - ・「正会員」とは、一般社団法人 企業研究会に法人会員として登録いただいている企業です。

◆お申込方法 : 以下 当会ホームページのお申込フォームより入力ください。体験参加も同様です。

- * ご記入いただいた個人情報は、CAMMに関する事務連絡および弊会主催事業のご案内に利用させていただきます。ご了承ください。
- * 著しく本フォーラムの趣旨に外れる言動をされる方については、幹事会の判断で退会いただく場合がございます。

◆担当 : 一般社団法人 企業研究会 CAMM担当 薄井玲子 e-mail: usui@bri. or. jp

〒110-0015 東京都台東区東上野1-13-7 ハナブサビル phone: 080-11393-5599 / 03-5834-3920