

第34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

2020年10月2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: 2020年10月2日(金) / 会場: 東京表参道「アイビーホール」 ※オンライン(Zoom)参加も可

* 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》

「インフォマティクスを実践するには何が必要か」

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 船津 公人 氏

ケモインフォマティクス、マテリアルズインフォマティクスが大きく注目されている。
わが国におけるこの取り組みの歴史を振り返りつつ、化学におけるインフォマティクスが
今どういう方向に向かおうとしているのかを事例を通して紹介したい。

●開催概要

◆期間：2020年10月2日(金)～2021年9月4日(金) 全12回(通常例会10回、合宿研究会2回)

10月	2020/10/2(金)	2月	2021/2/5(金)	6月	2021/6/4(金)
11月	2020/11/6(金)	3月	2021/3/5(金)	7月	2021/7/1(木)～2(金)あるいは7/2(金)のみ
12月	2020/12/4(金)	4月	2021/4/2(金)	8月	2021/8/6(金)
1月	2021/1/8(金)	5月	2021/5/14(金)	9月	2021/9/3(金)

8月、9月は日程変更の可能性もあります

◆例会会場：表参道「アイビーホール」など都内会議室 ※オンライン(Zoom)参加も可

◆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

●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、村田製作所
住友化学、計算科学振興財団
ダッソー・システムズ、東ソー、倉敷紡績
積水化学工業、日本ケミコン、ENEOS、
アーク・イノベーション

- ・MMI (みんなでマテリアルズ・インフォマティクス)
- ・材料数学/圏論
- ・Shining MD project
- ・各自からの話題提供(計算結果、論文紹介)
- ・メンバーの研究事例、失敗事例紹介
- ・興味のある物性、
研究テーマ最新研究動向把握も含めて

■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

- ・DMRG-CASSCFのお試し計算
- ・JupyterLab
- ・Gaussian、GAMESSの基底関数
- ・PyCaret で融点予測モデル構築
- ・その他、近況報告

■計算化学機能比較分科会■

参加メンバー

関西ペイント、住友金属鉱山
クレハ、クロスアビリティ、東レ
システム計画研究所、横浜ゴム
ブリヂストン、ナミックス、三井化学

- ・機械学習
分子生成(orGANic、graphNVP、chemVAE)
錯体の MI
Kaggle(主に分子特性のコンペ)調査
- ・反応予測
遷移状態探索の Python Script 化
(GAMESS の NEB 利用)
- ・Winmostar紹介
更新履歴

※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—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.camm.bri.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	産業科学研究所 産業科学ナノテクノロジーセンター 教授
	伊藤 聡 氏	計算科学振興財団	技術顧問
	菊池 真美 氏	(株)クレハ	医薬品事業開発部長
	長嶋 雲兵 氏	元 計算科学振興財団	共用促進・研究部門 部門長
	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
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

●前期 (第33期 2019年10月~2020年9月) 本例会 研究経過

10月	■CAMM運営幹事達による特別講演 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] 長嶋 雲兵 氏 [元 計算科学振興財団 共用促進・研究部門 部門長] 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]
11月	■「可変な凹凸構造やバルク性質による表面機能の拡張」 大園 拓哉 氏 [産業技術総合研究所電子光技術研究部門 分子集積デバイスグループ 主任研究員] ■「最近の研究から」 似鳥 啓吾 氏 [理化学研究所 計算科学研究センター 運用技術部門チューニング技術ユニット 技師]
12月 【合宿】	■「数理・数理科学を軸としたエネルギー問題への取り組み～予混火炎ダイナミクス: 精度保証付き数値計算も添えて～」 松江 要 氏 [九州大学マス・フォア・インダストリ研究所 助教、カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 WPI助教]
1月	■「KKRグリーン関数法を用いた磁性合金材料のデザイン」 福島 鉄也 氏 [東京大学 物性研究所データ統合型材料物性研究部門 特任准教授] ■「超並列計算を活用した実在系計算科学: 不均一系触媒における実例と展望」 古山 通久 氏 [物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 招聘研究員]
2月	■「量子輸送型量子コンピュータ」 多田 朋史 氏 [九州大学 エネルギー研究機構 教授] ■メンバー発表⑩ ~事業紹介・研究開発体制・計算科学への取り組みなど メンバー企業3社
3月	新型コロナウイルス感染拡大防止対策のため休会
4月	
5月	
6月	
7月	
8月	■「バンド計算コードの開発」 小口 多美夫 氏 [大阪大学 産業科学研究所 産業科学ナノテクノロジーセンター 教授]
9月	■分科会年間活動報告会

元 AGC(株)	(中央研究所主幹研究員)	高田 章	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピュータショナルデザイン研究センター	石田 豊和
大阪大学	産業科学研究所 産業科学ナノテクノロジーセンター 教授	小口多美夫	(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
(株)クレハ	医薬品事業開発部長	菊池 真美	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
元 計算科学振興財団	共用促進・研究部門 部門長	長嶋 雲兵	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
元 新日本製鐵(株)	(技術開発本部フェロー)	松宮 徹	住友ゴム工業(株)	研究開発本部分析センター	竹内 宗孝
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	積水化学工業(株)	R&D センター 開発推進センター GC グループ 課長	新明 健一
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	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
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	太陽誘電(株)	R&D センター材料開発部	岩崎誉志紀
元 金沢大学	(大学院自然科学研究科教授)	田子 精男	ダッソー・システムズ(株)	BIOVIA 事業本部 ソリューション サイエンティスト	桑原 理一
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	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
徳島大学	名誉教授	中馬 寛	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
日本ゼオン(株)	総合開発センター基盤技術研究室	本田 隆	(株)東芝	研究開発センター有機材料ラフトラリー 研究主務	吉田 孝史
元 日本電気(株)	(基礎・環境研究所フェロー)	大西 樽平	東ソー(株)	アドバンスマテリアル研究所 主任研究員	秋池 良
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	東レ(株)	先端材料研究所 研究主幹	茂本 勇
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	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
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	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
(株)アーク・イノベーション	ディレクター	檜貝 信一	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
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)村田製作所	技術・事業開発本部 新規技術センター 先端技術研究開発部 開発3課	岡田 康明
(株)クロスアビリティ	リサーチフェロー	石村 和也	(株)モルシス	マテリアルサイエンス部長	千葉 貢治
計算科学振興財団	共用専門員 研究部門主任研究員	西川 武志	横浜ゴム(株)	研究本部 小石研究室	古渡 直哉
コンプレックス(株)	代表取締役社長	大田 一男	(株)リコー	IP事業本部コンポネント事業センター FM第一開発室 開発グループ	左部 顕芳
(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピュータ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			

参加要領

※事業コード200029

<体験参加について> 第1回例会(10/2)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[1][2]のいずれかの方法でお申込ください。体験参加も同じです。

[1] Web : 当会ホームページよりお申込みいただけます。

[2] 担当者へのメール : 以下項目を担当:薄井 usui@bri.or.jp までご送信下さい。

①御社名 ②所在地 ③参加者お名前(ふりがな) ④ご所属・お役職 ⑤E-mail ⑥TEL ⑦正式参加 or 体験参加

ご派遣担当者がおられる場合は以下も併せてお知らせ下さい。

①ご派遣担当者お名前(ふりがな) ②ご所属・お役職 ③E-mail ④TEL ⑤請求書送付先(ご参加者 or ご派遣担当者)

- * 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ことがございます。

◆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

〒102-0083 東京都千代田区麹町5-7-2 MFPR麹町ビル 2階 phone:080-1393-5599 / 03-5215-3511