

第39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

2025年10月3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:2025年10月3日(金) / 会場:東京四ツ谷「主婦会館プラザエフ」およびオンライン(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】 今期年間研究テーマの設定 ※参加自由、新メンバーのご提案也大歓迎

13:15-18:15 【本例会】 基調講演・オリエンテーション・懇親会

《基調講演》

「実用化に向けて本格化したソフトセンサー利用とプロセスインフォマティクス」

奈良先端科学技術大学院大学

データ駆動型サイエンス創造センター センター長 特任教授

東京大学名誉教授 / 経済産業省「AI-SHIPS 受託事業」プロジェクトリーダー

船津 公人 氏

いうまでもなく「何を作るか」とともに「それをどう作るか」は化学および化学工学分野にとって重要な課題である。
さらに材料の物性は作り方によって影響される。

こうしたことから目的特性を持つ材料開発とその合成・製造プロセス条件を密接に関係づけることに
インフォマティクスをうまく使っていくことを意識した「プロセスインフォマティクス」の考え方が始まった。
その基本には材料設計とプロセス設計を連動させ、生産における品質管理にまでそのコンセプトを拡大することで、
ものづくり全体をインフォマティクスの土俵に乗せる思想がある。

●開催概要

◆期間： 2025年10月3日(金)～2025年9月4日(金) 全12回(通常例会10回、合宿研究会2回)

10月	2025/10/3(金)	2月	2026/2/6(金)	6月	2026/6/5(金)
11月	2025/11/14(金)	3月	2026/3/6(金)	7月	2026/7/2(木)～3(金)※合宿
12月	2025/12/4(木)～5(金)※合宿	4月	2025/4/3(金)	8月	2026/8/7(金)
1月	2026/1/9(金)	5月	2025/5/8(金)	9月	2026/9/4(金)

◆例会会場： 通常例会／都内会議室およびオンライン(Zoom)のハイブリッド開催 合宿／都内近郊

◆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。

■計算物理分科会■

参加メンバー

電力中央研究所、京セラ、住友化学、
ノリタケ、産総研、モルシス、日本大学、
計算科学振興財団、東ソー、日本サムスン

- ・みんなで Material Informatics
Python の便利なツールの紹介
フェーズフィールド法などによる焼結計算
パーシステントホモロジー
機械学習ポテンシャル
こんなことできるぞAIエージェント
- ・物性計算(電子状態、分子動力学)
Exiting MD Project
TDDFT関連話題
フォノンを介する物性(超伝導、IRラマン)
DMRGで電子相関
- ・コンピュータ技術
VPU、GPU、TPU、MN-Core2、
MONAKA(A64FX)の動向
富岳 Next プログラミング
(アクセラレータプログラミング)
ストレージ技術動向(DDN Lustre、PureStorage 等)
Google Colabo、Google NotebookLM、
クラウド LLM、ローカル LLM の活用
量子コンピュータ
- ・その他(材料設計、解析など)
各自からの話題提供(計算結果、論文紹介)
メンバーからの研究事例、失敗事例紹介
興味ある物性、研究テーマ最新研究動向把握

■計算化学応用分科会■

参加メンバー

クレハ、クラレ、産総研、DIC
コンプレックス、プリヂストン
クロスアビリティ

- ・粗視化ペプチド、ドッキング&バックマップ
- ・タンパク質シミュレーション
(構造予測、計算シミュレーション)
- ・粗視化力場調査(ポリマー?)
- ・自由エネルギー、アンブレラサンプリング
- ・機械学習力場・反応解析
- ・機械学習アプリ(LLM)

■計算化学機能比較分科会■

参加メンバー

クレハ、ADEKA、関西ペイント
クロスアビリティ、ナミックス
システム計画研究所、東レ
住友金属鉱山、横浜ゴム
ダイキン工業

- ・xTB、DFTB+
無機有機界面、FMO でも? 大規模系、オリゴマー
(ポリマー)、合成
ポテンシャルの質、確認
ポリマー物性(長時間 MD 必要)
- ・機械学習ポテンシャル
UMA、MACE、PIMD(DFTB+), nequip-allegro
- ・ベイズ最適化
配合+分子生成、(量子アニーリング)
高次元最適化
GMR、遺伝的アルゴリズム
- ・計算データから実験(or 計算)データ予測
Radonpy の公開データでお試し
- ・LLM
MCP サーバー(計算を指示してやってもらう Dify)

※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超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

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2回(12月、7月)》

- ・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
小口 多美夫 氏
伊藤 聡 氏
長嶋 雲兵 氏
松宮 徹 氏
石田 雅也 氏
大沼 敏治 氏
宮本 良之 氏
稲葉 祐策 氏

ロンドン大学
大阪大学
計算科学振興財団
横浜市立大学大学院
元 新日本製鐵(株)
住友化学(株)
電力中央研究所
産業技術総合研究所
(株)クレハ

客員教授(元 AGC(株) 中央研究所共通基盤センター主席研究員)
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
技術顧問
ナノバイオサイエンス科学研究科 客員教授
フェロー
先端材料開発研究所 技術室 兼 デジタル革新部
材料科学研究所 構造材料領域 上席研究員
先進パワーエレクトロニクス研究センター新機能デバイスチーム 招聘研究員
生産技術イノベーションセンター イノベーションテクノロジー部 主任技師

研究企画協力委員

田子 精男 氏
田辺 和俊 氏
北村 一泰 氏
中馬 寛 氏
本田 隆 氏
大西 楷平 氏
善甫 康成 氏
中村 振一郎 氏
菊池 真美 氏

元 金沢大学 大学院
元 (独)産業技術総合研究所
摂南大学
徳島大学
日本ゼオン(株)
元 日本電気(株)
法政大学
熊本大学
(株)クレハ

自然科学研究科 教授
計算科学研究部門 総括研究員
薬学部 客員教授 (元 大正製薬 取締役医薬研究開発担当)
名誉教授
総合開発センター 基盤技術研究室
基礎・環境研究所 フェロー
情報科学部 デジタルメディア学科情報科学研究科 教授
大学院先端機構 特任教授
CSR 部長(前・医薬品事業開発部長)

●前期（第38期 2024年10月～2025年9月）本例会 研究経過

10月	■「遺伝情報のビッグデータ解析～速度だけを求めるのではない、莫大なデータ量をどのように正確に対応、処理するか？」 東京科学大学 M&Dデータ科学センター 特任教授・センター長 宮野 悟 氏 ◆オリエンテーション・全体懇親会
11月	■「分岐理論に基づく様々な『形』の追跡」 九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 教授 松江 要 氏 ■「VR (Virtual Reality)による分子構造表示の紹介」 筑波大学 計算科学研究センター 教授 庄司 光男 氏
12月	■「材料開発における4つのインフォマティクスと自律材料探索とLLM」 物質・材料研究機構 マテリアル基盤研究センター(GBRM) 材料設計分野 データ駆動型材料設計グループ 主任研究員 岩崎 悠真 氏
1月	■「量子力学100周年記念講演？TDDFT計算で化学の常識に挑戦 『変な計算結果:それはまちがいか、それとも。。。』」 産業技術総合研究所 先進パワーエレクトロニクス研究センター 新機能デバイスチーム 招聘研究員 宮本 良之 氏 ■「実時間TDDFTの時系列データのスペクトル解析手法の改良」 法政大学 情報科学部 教授 善甫 康成 氏
2月	■「第一原理計算に基づく材料形成・加工機構の検討」 島根大学 学術研究院 理工学系教授 影島 博之 氏
3月	■「タンパク質フォールディング問題への第一原理からの挑戦」 金沢大学 理工研究域数物科学系 教授 三浦 伸一 氏 ■「陽電子消滅を用いた半導体デバイス関連材料の空孔型欠陥・空孔の検出」 筑波大学 数理物質系教授 上殿 明良 氏
4月	■「機械学習分子動力学法の加速と効率的な学習法: 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」 東京大学 情報基盤センター学際情報科学研究部門 准教授 永井 佑紀 氏 ■「ボストンから見たMI・DX」 Kyulux North America Inc. Computational R&D Group マネージャー 山本 海 氏
5月	■「スピントロニクスの最近の話題から」 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ントロニクス理論研究チーム チームリーダー 多々良 源 氏 ■「バイオマテリアルデザインに向けた分子溶媒和理論の構築とプログラム開発」名古屋大学 情報科学科教授 吉田 紀生 氏
6月	■「不規則材料の計算物質科学の進展」 山形大学 学術研究院(理学担当)准教授 笠松 秀輔 氏 ■「原子配列解析ソフトVorotis: 多面体コード理論と適用例」 産業技術総合研究所 マテリアルDX研究センター 主任研究員 西尾 憲吾 氏
7月	■「ワイドギャップ半導体: ドーピングと光中心の理論探索」 産業技術総合研究所 先進パワーエレクトロニクス研究センター新機能デバイスチーム 招聘研究員 宮本 良之 氏
8月	■「材料科学における現代数学」 金沢大学大学院 自然科学研究科 教授 松谷 茂樹 氏 ■「量子とタンパク質」 東京大学 生産技術研究所 教授 佐藤 文俊 氏
9月	■分科会年間活動報告会

前期(第38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	(株)クラレ	研究開発本部くらしき研究センター 融合技術領域探索グループ	松原 裕樹
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	(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	林 卓弥
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)クロスアビリティ	リサーチフェロー計算科学事業部	坂牧 隆司
元 新日本製鐵(株)	(技術開発本部フェロー)	松宮 徹	計算科学振興財団	共用専門員兼 研究部門 主任研究員	西川 武志
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	コンフレックス(株)	代表取締役社長	大田 一男
電力中央研究所	材料科学研究所 構造材料領域 上席研究員	大沼 敏治	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 主任研究員	石田 豊和
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	独産業技術総合研究所	ゼロエミッション国際共同研究センター	小寺 正徳
産業技術総合研究所	先進パワーエレクトロニクス研究センター 新機能デバイスチーム 招聘研究員	宮本 良之	(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	生産技術イノベーションセンター イノベーションテクノロジー部 主任技師	稲葉 祐策	住友金属鉱山(株)	技術本部数理解析技術部 CAE グループ	高橋 慧
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	大森 遼
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	西山侑太郎
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)	北村 一泰	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
徳島大学	名誉教授	中馬 寛	東レ(株)	先端材料研究所 研究員	北畑 雅弘
日本ゼオン(株)	総合開発センター 基盤技術研究室	本田 隆	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	小林 誠
元 日本電気(株)	(基礎・環境研究所フェロー)	大西 檜平	日本サムスン(株)	Samsung デバイスソリューションズ研究所	竹谷 考司
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	日本大学	医学部一般教育系化学分野 准教授	小松徳太郎
熊本大学	大学院先導機構 特任教授	中村振一郎	ノリタケ(株)	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
(株)クレハ	CSR 部副部長 (前・医薬品事業開発部長)	菊池 真美	(株)ブリヂストン	サステナブル・先端材料統括部門分析基盤技術研究部 先端分析技術研究課	佐藤 弘一
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	(株)ブリヂストン	サステナブル・先端材料統括部門分析基盤技術研究部 先端分析技術研究課	大熊 孝広
ADEKA(株)	樹脂添加剤本部樹脂添加剤開発研究所 安定剤開発室	山下 将享	(株)モルシス	マテリアルサイエンス部	藤原 敦志
関西ペイント(株)	開発調達部門 R&D 本部 新領域技術開発部 インシリコ・システム G	川嶋 裕介	横浜ゴム(株)	研究先行開発本部 AI研究室	金子 和義
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	増子 貴子			

参加要領

＜体験参加について＞ 第1回例会(10／3)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4万円程度)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 : 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。 **企業研究会 CAMM 検索**

- * 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フォーラム担当 薄井(うすい) 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: 080-1393-5599 / 03-5834-3920