

第37期 CAMMM

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

2023年10月10日(火) 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。

CAMMM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:2023年10月10日(火) / 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も大歓迎

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》

「今、ライフサイエンス分野では計算科学が熱い!!」

自然科学研究機構 基礎生物学研究所 所長 阿形 清和 氏

今年の12/14に国際生物学賞の授賞式が東京で行われる。

受賞者はケンブリッジ大学のダービン教授である(https://www.jsps.go.jp/j-biol/03_recipients/39_awardee.html)。

いろいろな受賞理由がある中でも、限られた個体のゲノムデータから生物集団の歴史を推測する

PSMC/MSMC 手法を開発したことで世界に衝撃を与えた。計算科学の大勝利であった。

そして、われわれの国立基礎生物学研究所でも『超階層生物学(Trans-Scale Biology)』なる新たなチャレンジを開始した。

将来的に、遺伝型(genotype)がわかれば表現型(phenotype)を予測できるようになる、

あるいは逆に表現型(phenotype)からゲノム配列を予測できる時代を迎えるための生物学の挑戦である。

しかし、そこには計算科学とのコラボが必須と考え、研究所内にAI解析室なるものを新規に設置した。

ここでは、計算科学の専門家と一緒に将来のライフサイエンスの方向性について考える機会を提供したい。

●開催概要

◆期間： 2023年10月10日(火)～2024年9月6日(金) 全12回(通常例会10回、合宿研究会2回)

10月	2023/10/10(火)	2月	2024/2/2(金)	6月	2024/6/2(金)
11月	2023/11/10(金)	3月	2024/3/1(金)	7月	2024/7/4(木)～5(金)※合宿
12月	2023/12/7(木)～8(金)※合宿	4月	2024/4/5(金)	8月	2024/8/2(金)
1月	2024/1/12(金)	5月	2024/5/10(金)	9月	2024/9/6(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。

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
リタケカンパニーリミテド、産総研、東ソー
モルシス、日本大学、計算科学振興財団
住友化学、ダイキン

・物性計算(電子状態、分子動力学)

Lightning MD Project
FPSEID²¹ 関連話題

・みんなで Materials Informatics

Python の便利なツールの紹介

第一原理計算 DB を用いた誘電特性の予測

画像を使った物性予測、画像の前処理の方法

パーシステントホモロジー

計測インフォマティクス

・コンピュータ技術

富岳、GPU、VPU、TPU Google Colabo

・量子コンピュータ

量子化学コードプロジェクト

・その他(材料設計、解析など)

■計算化学応用分科会■

参加メンバー

クレハ、DIC、コンフレックス
産総研、東芝、ブリヂストン
ADEKA、大阪ガスケミカル
リコー

・機械学習ポテンシャル

・Auto3D

・AlphaFold2

・膜シミュレーション

・励起状態計算

・OpenModelica

■計算化学機能比較分科会■

参加メンバー

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

・機械学習

機械学習ポテンシャル環境構築
～金属(AI)、共有結合性結晶(SiC)

ベイズ最適化(PHYSBO)

・Winmostar 紹介

※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2回(12月、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	ロンドン大学	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)
	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	計算科学振興財団	技術顧問
	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 構造材料領域 上席研究員
	宮本 良之 氏	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
	稲葉 佑策 氏	(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
	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 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		熊本大学	大学院先端機構 特任教授
菊池 真美 氏		(株)クレハ	CSR 部長(前・医薬品事業開発部長)
研究会顧問		堂山 昌男 氏	東京大学

●前期(第36期 2022年10月~2023年9月)本例会 研究経過

10月	■現代の錬金術:多元素ナノ合金の開発と応用展開 北川 宏 氏 [京都大学 大学院理学研究科 化学専攻 固体物性化学学科 教授] ◆オリエンテーション
11月	■「最近の研究から」 大谷 実 氏 [筑波大学 計算科学研究センター 量子物性研究部門 教授] ■「凝縮相における化学反応動力学」 南部 伸孝 氏 [上智大学 理工学部 物質生命工学科 教授]
12月	■「賢くない個たちによる賢い組織づくり」 西森 拓 氏 [明治大学 研究・知財戦略機構 先端数理科学インスティテュート 特任教授]
1月	■「流体シミュレーションのための粒子法の開発と商用化」 越塚 誠一 氏 [東京大学 大学院工学系研究科 システム創成学専攻 教授] ■「分子動力学ストレスソル制御法による新規液晶相の発見」 青木 圭子 氏 [早稲田大学 各務記念材料技術研究所 客員上級研究員]
2月	■「病気の原因となるタンパク質分子動力学シミュレーション」 奥村 久士 氏 [自然科学研究機構 生命創成探究センター/分子科学研究所/計算科学研究センター 准教授] ■「統合型材料デザインによる『鉄鋼材料の設計』を目指した取り組み」 足立 吉隆 氏 [名古屋大学大学院 工学研究科材料デザイン工学専攻 構造形態制御工学研究室 教授]
3月	■「二次元物質のトポロジカル特性と光学応答の理論」 若林 克法 氏 [関西学院大学 工学部 教授] ■「大規模第一原理計算プログラムCONQUESTの紹介」 宮崎 剛 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) MANA主任研究者/グループリーダー]
4月	■「水素化物高温超伝導について最近の研究か」 石河 孝洋 氏 [東京大学 大学院理学系研究科 特任助教] ■「光応答分子を用いたバイオミメティック結晶成長とバイオ分野への応用」 内田 欣吾 氏 [龍谷大学 先端理工学部応用化学課程教授]
5月	■「生体系における大規模分子軌道計算 - フラグメント分子軌道(FMO)法の応用例」 渡邊 寿雄 氏 [東京工業大学 学術国際情報センター マネジメント准教授] ■「散逸構造形成に関する小実験」 森 義仁 氏 [お茶の水女子大学 理学部化学科 教授]
6月	■「第一原理フォノン計算を用いた有限温度における構造最適化」 只野 央将 氏 [物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究センター 主任研究員] ■「中分子創薬を加速する大規模分子シミュレーション」 秋山 泰 氏 [東京工業大学 大学院情報理工学研究科 教授]
7月	■「レーザー加工の素過程を第一原理計算で読み解く」 宮本 良之 氏 [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]
8月	■「凝縮系の理論化学:分子集団の理論」 佐藤 啓文 氏 [京都大学 工学研究科 分子工学専攻分子理論化学講座 教授] ■「機械学習は何でもありか!? 野菜の市場価格とドッキング配座の予測法」 後藤 仁志 氏 [豊橋技術科学大学 情報メディア基盤センター教授]
9月	■分科会年間活動報告会

前期(第36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	京都大学	大学院 理学研究科 教授	北川 宏
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
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	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
元 新日本製鐵(株)	(技術開発本部フェロー)	松宮 徹	コンフレックス(株)	代表取締役社長	大田 一男
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	(独)産業技術総合研究所	機能材料コンピューショナルデザイン研究センター	石田 豊和
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	(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
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	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
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	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
(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	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	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 (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	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
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	(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
徳島大学	名誉教授	中馬 寛	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
日本ゼオン(株)	総合開発センター-基盤技術研究室	本田 隆	東ソー(株)	アドバンストマテリアル研究所 主任研究員	服部 一希
元 日本電気(株)	(基礎・環境研究所フェロー)	大西 楷平	東レ(株)	先端材料研究所 デジタルマテリアルサイエンスグループ主任研究員	山本 海
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	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
熊本大学	大学院先端機構 特任教授	中村振一郎	日本大学	医学部一般教育系化学分野 准教授	小松徳太郎
(株)クレハ	CSR 部副部長 (前・医薬品事業開発部長)	菊池 真美	(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
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	(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
ADEKA(株)	研究企画部 研究企画室	遠山 薫樹	(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
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	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	中野 隆志
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	長嶋 太一	(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)	R&D 本部基礎研究所第2研究部	長野 千尋	横浜ゴム(株)	研究本部 小石研究室	古渡 直哉
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)リコー	先端技術研究所共通基盤センター 第二解析技術室基盤解析グループ グループリーダー	左部 顕芳

参加要領

※事業コード230029

<体験参加について> 第1回例会(10/10)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3万5千円~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 : 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。 **CAMM** **検索**

- * ご記入いただいた個人情報、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 ハナサザビル phone:080-1393-5599 / 03-5834-3920