

第38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

2024年10月4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:2024年10月4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】今年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》

「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？」

東京医科歯科大学(※10月から東京科学大学) M&D データ科学センター特任教授 センター長
東京大学名誉教授 宮野 悟 氏

- 国際ヒトゲノム計画はどのように始まりどこへいったのか。がんゲノムに至るまで。
- スーパーコンピュータでがんゲノム解析からネットワークへ
- 発見AIが一挙に暴き出すがんの本態
- 「平成」のがん研究の終わり

●開催概要

◆期間： 2024年10月4日(金)～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	2024/10/4(金)	2月	2025/2/7(金)	6月	2025/6/6(金)
11月	2024/11/1(金)	3月	2025/3/7(金)	7月	2025/7/3(木)～4(金)※合宿
12月	2024/12/5(木)～6(金)※合宿	4月	2025/4/4(金)	8月	2025/8/1(金)
1月	2025/1/10(金)	5月	2025/5/16(金)	9月	2025/9/5(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、産総研、モルシス、日本大学、
住友化学、計算科学振興財団、東ソー

- ・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
パーシステントホモロジー
計測インフォマティクス
機械学習ポテンシャル
- ・物性計算(電子状態、分子動力学)
Lightning MD Project
FPSEID²¹ 関連話題
フォノンを介する電子物性(超電導、誘電率)
- ・コンピュータ技術
富岳(Arm64)、VPU、GPU、TPU、
Google Colabo、富岳 NEXT、商用クラウドの紹介
量子コンピュータ
- ・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

ADEKA、クレハ、クラレ、産総研
コンプレックス、ダイキン DIC、東芝
東レ、ブリヂストン、リコー

- ・MM-PB(GB)SA 法
- ・MM-PB/SA 法による薬剤スクリーニング
- ・AlphaFold X(1³)の周辺領域
- ・機械学習ポテンシャルの化学反応への応用
- ・Raspberry Pi 5 のベンチマーク
- ・励起状態計算・溶媒(水)を介した ESIPT

■計算化学機能比較分科会■

参加メンバー

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

- ・機械学習
- ・ベイズ最適化(PHYSBO)
- ・GMMR
- ・分子生成 MOOD: 拡散モデルによる分子生成
- ・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)》

・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 祐策 氏	(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
	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		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37期 2023年10月~2024年9月) 本例会 研究経過

10月	<ul style="list-style-type: none"> ■「今、ライフサイエンス分野では計算科学が熱い!!!」 ◆オリエンテーション、全体懇親会 	自然科学研究機構 基礎生物学研究所 所長 阿形 清和 氏
11月	<ul style="list-style-type: none"> ■「データ駆動時代の計算化学:ハイエントロピー材料創製に向けた取り組み例」 ■「マルチスケール心臓シミュレータUT-Heartはどのように生物物理と医療を結ぶ懸け橋となりうるか」 	信州大学 先鋭材料研究所教授 古山 通久 氏 (株)UT-Heart研究所 取締役副社長、東京大学 新領域創成科学研究 特任研究員 鷲尾 巧 氏
12月	<ul style="list-style-type: none"> ■「実時間TDDFTのスペクトル解析手法について」 	法政大学 デジタルメディア学科 メディア科学分野計算物理研究室教授 善甫 康成 氏
1月	<ul style="list-style-type: none"> ■「磁性材料データの創出とその活用」 ■「磁気形状記憶合金のマルテンサイト変態機構解明へ向けて」 	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 材料インフォマティクスチーム研究チーム長 福島 鉄也 氏 金沢大学 理工研究域 数物科学系教授 小田 竜樹 氏
2月	<ul style="list-style-type: none"> ■「アルミニウム粒界の有限温度第一原理計算」 ■「A64FXでの重力N体計算カーネルのチューニング」 	関西学院大学 理工学部情報科学科教授 西谷 滋人 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 似鳥 啓吾 氏
3月	<ul style="list-style-type: none"> ■「Multiscale Materials Modeling: A Vision becoming Reality」 ■「計算化学が加速する機能性材料の開発」 	Materials Design社 取締役会会長兼CSO Erich Wimmer 氏 慶応義塾大学 理工学部化学科 理論化学研究室 准教授 畑中 美穂 氏
4月	<ul style="list-style-type: none"> ■「密度汎関数理論計算に基づく表面・界面における化学過程のモデリング」 ■「マルチスケールモデリングによるナノ・マイクロ機械物理問題への取組み」 	大阪大学大学院 工学研究科 准教授 濱田 幾太郎 氏 東京大学 生産技術研究所 教授 梅野 宜崇 氏
5月	<ul style="list-style-type: none"> ■「マイクロバイオーム研究の動向」 ■「分子軌道法と機械学習を用いた分子物性の予測について」 	国立遺伝学研究所 副所長/情報研究系ゲノム進化研究室 教授 黒川 顕 氏 城西大学 理学部化学科 教授 寺前 裕之 氏
6月	<ul style="list-style-type: none"> ■「最近の研究から」 ■「機械学習と第一原理計算による物質の構造解析と探索」 	熊本大学 工学部材料・応用化学科 准教授 杉本 学 氏 東京大学 生産技術研究所 教授 溝口 照康 氏
7月	<ul style="list-style-type: none"> ■「マイナー分野の一発逆転へ！ 近年沸騰中(!?)のダイヤモンド研究へのTDDFTの応用」 	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	<ul style="list-style-type: none"> ■「計算科学の活用例とそのマネジメントについて」 ■「グリーンイノベーション(GI)基金とグリーントランスフォーメーション(GX)の現状と計算科学への期待」 	元(株)カネカ 先端材料開発研究所、(株) クロスアビリティ 顧問 毛利 文仁 氏 産業技術総合研究所 エネルギー・環境領域 電池技術研究部門 総括研究主幹 田中 真悟 氏
9月	<ul style="list-style-type: none"> ■分科会年間活動報告会 	

前期(第37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
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タショナルデザイン研究センター 主任研究員	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	(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
計算科学振興財団	技術顧問	伊藤 聡	(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
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	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
(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	ダイキン工業(株)	テクノロジー・イノベーションセンター	吉崎 達
元 金沢大学	(大学院自然科学科学研究科教授)	田子 精男	太陽誘電(株)	R&D センター-材料開発部	岩崎誉志紀
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
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)	アドバンスドマテリアル研究所 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)	有機材料研究所 有機 EL 材料 G1	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 研究員	北畑 雅弘
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	西川 智裕
熊本大学	大学院先端機構 特任教授	中村振一郎	ナミック(株)	技術開発本部 開発グループ 要素技術チーム	小林 誠
(株)クレハ	CSR 部副部長 (前・医薬品事業開発部長)	菊池 真美	日本大学	医学部一般教育系化学分野 准教授	小松徳太郎
東京大学	工学部名誉教授	堂山 昌男	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
ADEKA(株)	研究企画部 研究企画室	遠山 薫樹	(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
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)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
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 インジロコ・システム G	長野 千尋	(株)モルシス	マテリアルサイエンス部	藤原 敦志
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	横浜ゴム(株)	研究先行開発本部 AI研究室	金子 和義
(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	(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

＜体験参加について＞ 第1回例会(10/4)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