

CAMSE'90-CAMSE'92-COMMP'93

—第2回分子・材料工学国際会議(CAMSE'92)に出席して

斉藤 良行

川崎製鉄㈱ 鉄鋼研究所

CAMSE'92国際会議パシフィコ横浜で開催される

第2回分子・材料工学国際会議(CAMSE'92、組織委員長：堂山昌男 西東京科学大学教授、主催：第2回分子・材料工学国際会議組織委員会、日刊工業新聞)は1992年9月22日から25日までの日程でパシフィコ横浜で開催された。会議には計算化学、計算物理、材料科学の各分野で17ヶ国から約450件の論文が発表され、盛況のうちに終了した。

パシフィコ横浜は「みなとみらい21」に建設された新しい国際会議場で、会議のテーマにふさわしい現代的な雰囲気があり、また海が目の前に広がり大変すばらしい環境であった。私は実行委員会の末席につらなっていたが、発表のない気楽さもあって、担当セッションに出席したほかは、興味のおもむくままに講演を聴講し、古い友人たちとの再会を喜び、新しくできた友人たちとの討論を楽しみ、非常に有意義な時間を過ごした。

ところが、会議終了後10日あまりたつて開かれた本会の和文会誌分科会において、木原主査(CAMSE'92の実行委員長でもある)より、国際フォーラムに会議のことを執筆するように指名された。会期中に木原先生と何回か顔を合わせることがあったため、先生は私がまじめに会議に出席したと誤解されているようだ。先生の誤解をそのままにしておきたいので、断片的な印象しか書けないのにもかかわらず、無謀にも執筆を引き受けてしまった。後になって、これは困ったことになってしまったと後悔したのも後の祭であった。

一出席者が会議全体について展望することは不可能であるし、私自身の興味の範囲でしか聴講していないので、会議の報告にはとてもなりそうもない。しかし鉄鋼メーカーの平均的な研究者の感想を示すことによって、会員の皆様にコンピュータシミュレーションの現状についての認識をもっていただき、さらに本年9月に予定している本会主催の材料設計およびプロセス工学へのコンピュータ利用に関する国際会議(COMMP'93)に対して多くの方々の興味を引き起こすきっかけになればと思い、以下拙い印象記を記述する。

CAMSE'90からCAMSE'92へ

CAMSE'92の正式名称はThe Second International Conference & Exhibition on Computer Application to Materials and Molecular Science and Engineeringであり、1990年に池袋のサンシャインシティで開催され約230件の論文、

600名の参加者を集めたCAMSE'90に引き続いて日本で開催されたものである。CAMSE'90からCAMSE'92になり、名称面での変更はCAMSEのMがMaterialsからMaterials and Molecularに置き変わったことであり、最近の計算化学、分子設計分野の発展を反映している。運営面でも第1回の経験が生かされており、今回は分野毎に設置されたシンポジウムで、招待講演者の選定、プログラム、論文査読など会議の運営にかかわるかなりの部分がまかされた。組織委員、実行委員から構成される各シンポジウムの運営委員たちの責任は重くなったが、会議の運営に関しては、創意・工夫ができるという点でよかったのではないかと思う。

連日各会場で活発な討論が繰り広げられる

CAMSE'92の対象分野は以下に示す19の分野のシンポジウムの名称からもわかるように、知識工学、計算物理、計算化学、分子設計・材料設計、プロセス工学など計算科学全般にわたっている。

A. 情報の戦略的活用、B. 材料研究における電子論、C. 分子動力学、D. 材料欠陥と不規則系物質-原子模型解析と原子操作、E. 状態図、F. 量子化学、G. 分子力学、H. ケモメトリックスと化学パターン認識、I. 有機合成設計と構造推定、J. 触媒、K. 薬物・分子設計、L. 生体高分子解析とタンパク工学、M. 高分子材料-科学、工学、設計、N. 合金設計、O. 複合材料、P. ガラスとセラミックス、Q. 半導体材料、R. 計算力学、S. 工業用材料のプロセスシミュレーション。

計算力学、計算化学、分子設計、電子回路設計のように、実用化やソフトウェアの整備の進んでいる分野、第一原理計算の成果が現れはじめている計算物理の分野、ミクロ・メソスコピック・マクロ系での各シミュレーションモデルがそれぞれの特徴を生かした領域で地道な発展をとげている材料設計、プロセスシミュレーションの分野、人工知能、並列計算機、仮想現実と話題の多い分野など多岐にわたる内容に関して連日、活発な討論が行われた。

本会の活動範囲も広がり、上記のA～Sの各シンポジウムになんらかの形で関与されていると思うが、特に関連深い分野であり、また私が出席したシンポジウムでもある、状態図・材料設計、工業用材料のプロセスシミュレーションについての印象を以下に示す。

状態図と材料設計分野はこの2つのシンポジウムの合同セッションという形で運営された。15件の招待講演を含む

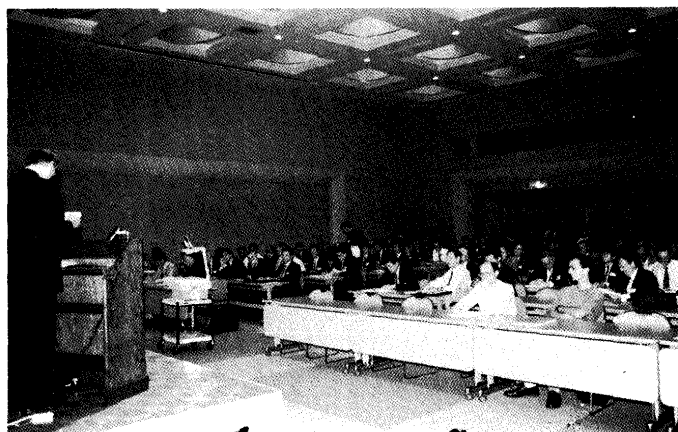


写真1 発表会場の風景

23件の口頭発表、7件のポスタープレゼンテーションが行われた。平衡状態の計算に関しては副格子モデル、クラスター変分法(CVM)、分子軌道法、CVMと密度汎関数法との組み合わせた第一原理計算など多種多様であり、また対象とする材料も鉄合金、Ti合金、Ni合金、金属間化合物、III-V化合物半導体など多岐にわたっている。またkineticsに関しても拡散型相変態無拡散変態、相分離についての基礎的なシミュレーション手法の紹介や、加工熱処理過程における組織形成過程の予測といった実用的な成果も紹介された。

工業用材料のプロセスシミュレーションでは6件の招待講演を含む9件の口頭発表と12件のポスタープレゼンテーションが行われた。還元・精錬プロセス、電磁流体プロセス、鋳造・凝固・溶接プロセス、モールドインジェクションプロセス、焼結プロセス、材料成形プロセス、加工熱処理など広範囲にわたるシミュレーションの成果が発表された。鉄鋼材料についても原料、還元、精錬、加工熱処理、溶接と鋼材製造工程のほとんど全工程をカバーするシミュレーションが一つのセッションで聴講できたことは興味深かった。各工程におけるシミュレーション手法の違いを認識するだけでなく、材料分野のシミュレーションの道具とばかりおもっていたパーコレーションモデルが鉄鉱石の焼結時における形態解析に使われていることがわかり驚くとともに計算手法の普遍性に感銘を受けたりした。私は当会の講演大会では製鋼分野をたまたに聴講するのを除けば、材料分野以外の講演を聴くことがないが、今回のようにプロセスシミュレーションということで他分野の話をじっくり聴講できた事は有意義であった。

状態図・材料設計、プロセスシミュレーションとも華やかな話題の多い計算化学、分子設計、計算物理にくらべ、計算科学のなかではどちらかというと地味な存在である。しかし、今回は会場が小さいせいもあったが、何人もが立って聴講するという盛況ぶり、この分野への関心の高さを感じることができ、大いに力づけられた。

会議と並行して展示会が開催される

国際会議の会場に隣接する展示場で国際会議と並行して

展示会が開催された。バブルの崩壊による悪条件のなかで、前回のCAMSE'90と同規模の45社からの出展があった。出展会社はコンピュータメーカー、ソフトウェアメーカーをはじめ、鉄鋼、電機、化学、計測機器メーカー、出版会社など多岐にわたっているが、出展対象は分子設計、画像解析、構造解析ソフトウェアとエンジニアリングワークステーションがほとんどであり、特に分子設計モデルシステムへの関心の高さは目をみはるほどであった。計算化学、分子設計分野では計算手法が確立し、汎用ソフトウェアの整備が進んでいることが、このことから裏付けられる。



写真2 初日に開かれたget together Party

COMMP'93に向かって

CAMSE'92が終わって一安心といきたいところであるが、今度はCOMMP'93が待っている。

COMMP'93は本会主催の国際会議なので、会員の皆様もよく御存知だとは思いますが、会議の正式名称はInternational Conference on Computer Assisted Materials Design and Process Simulationであり、本年9月6日から9日まで日本都市センターで開催される。新居和嘉金属材料技術研究所所長が組織委員長を務められ、大学、国立研究所、鉄鋼メーカーのメンバーが組織委員会を構成している。21件の招待講演を含む105件の論文が16ヶ国から投稿され、すでにアブストラクトの審査も終わっている。会議の主題であるプロセスシミュレーション、材料設計、プロセス設計・材料設計のための計算機技術に関して、マクロな系から電子論に基づくミクロモデルに至るまでバラエティに富んだ内容のシミュレーションモデルについての発表が行われる。内容に関してはCAMSE'92と共通するところも多いが、対象はかなりしぼられたものになっている。COMMP'93は本会主催の国際会議の中でもユニークな内容の会議になると確信している。多数の会員の皆様の参加を期待して拙い印象記を終えたい。

最後にCAMSE'92の写真、資料を提供頂いた日刊工業新聞国際事業局に感謝の意を表します。

(平成5年1月6日受付)