

# 「化学・素材業界におけるデジタルトランスフォーメーションの最新調査レポート」 目次

## 第1章 AI、機械学習、ディープラーニング

1. 概要
2. AI とは
3. 機械学習
4. 「教師あり学習」と「教師なし学習」
5. ディープラーニング
6. 機械学習とディープラーニングの関係
  - 6.1 概要
  - 6.2 適しているプロジェクト
  - 6.3 利用可能なハードウェアと展開

## 第2章 マテリアルズ・インフォマティクス(MI)

1. 概要
2. MI と従来の材料開発の違い
3. MI による効果
4. MI の課題と対策
5. AI との関係と成功へのポイント
6. 量子コンピュータとの関係と今後、予想される展開
7. 各国の取り組み
  - ① 米国
  - ② 中国
  - ③ 欧州
  - ④ 韓国
  - ⑤ 台湾
  - ⑥ 日本
8. “理論・実験・計算・データ” 科学
9. 計算化学
  - 9.1 概要
  - 9.2 計算化学の種類
  - 9.3 基底関数
  - 9.4 計算科学とデータ科学
  - 9.5 計算化学とMI の融合
10. 第一原理計算
  - 10.1 概要
  - 10.2 量子化学計算
  - 10.3 第一原理計算を始めるには
  - 10.4 課題
  - 10.5 機械学習を第一原理計算に適用するケース
  - 10.6 第一原理計算を用いた材料別ケース
    - 10.6.1 概要
11. スパースモデリング
  - 11.1 概要
  - 11.2 スパースモデリングが注目される背景
  - 11.3 ディープラーニングの問題点
  - 11.4 応用例
  - 11.5 企業動向
    - ① HACARUS
    - ② バイエル薬品
    - ③ 大阪ガス
    - ④ 東芝
    - ⑤ DS ファーマアニマルヘルス
    - ⑥ 慶應義塾大学、東京大学
    - ⑦ 慶應義塾大学
12. 化学分野の人材育成
13. 高分子材料
  - 13.1 概要
  - 13.2 企業のビジネス動向

- ① 旭化成
  - ② 三菱ケミカル
  - ③ 三井化学
  - ④ 本州化学
  - ⑤ 住友化学
  - ⑥ JSR
  - ⑦ 日本触媒
  - ⑧ 東ソー
  - ⑨ ポリプラスチックス
  - ⑩ 日油
  - ⑪ NEC
  - ⑫ 長瀬産業
  - ⑬ 旭化成、住友化学、三井化学、三菱ケミカル
  - ⑭ QuesTek Innovations
- 13.3 開発動向
    - ① コニカミノルタ
    - ② 昭和電工
    - ③ Kyulux
  14. 金属・無機材料
    - 14.1 概要
    - 14.2 企業のビジネス動向
      - ① 日本製鉄
      - ② JFE スチール
      - ③ 神戸製鋼所
      - ④ 日本製鉄、JFEHD、神戸製鋼所
    - 14.3 開発動向
      - ① 日立製作所
      - ② UACJ
      - ③ パナソニック
      - ④ 東芝デジタルソリューションズ
      - ⑤ アーヘン工科大学
  15. AI と有機合成化学
    - 15.1 概要
    - 15.2 開発動向
      - ① 大阪大学
      - ② TRUST SMITH
      - ③ 理化学研究所
  16. MI の用途別適用事例
    - 16.1 触媒
      - 16.1.1 概要
      - 16.1.2 開発動向
        - ① 旭化成
        - ② 日本触媒
        - ③ BASF
        - ④ 北海道大学
        - ⑤ 北陸先端科学技術大学院大学
    - 16.2 リチウムイオン電池
      - 16.2.1 概要
      - 16.2.2 開発動向
        - ① パナソニック
        - ② サムスン電子
        - ③ 富士通
        - ④ シャープ
        - ⑤ MI-6
        - ⑥ 物質・材料研究機構、名古屋工業大学、トヨタ自動車
    - 16.3 半導体
      - 16.3.1 概要
      - 16.3.2 開発動向

- ① 東京工業大学
- ② 東京エレクトロン
- ③ DIC
- 16.4 太陽電池
  - 16.4.1 概要
  - 16.4.2 開発動向
    - ① 大阪大学
    - ② 理化学研究所
    - ③ 豊田中央研究所
- 16.5 誘電体材料
  - 16.5.1 概要
  - 16.5.2 開発動向
    - ① ファインセラミックスセンター、TDK、京都大学、物質・材料研究機構
- 16.6 熱電変換材料
  - 16.6.1 概要
  - 16.6.2 開発動向
    - ① NEC
    - ② 東京大学
- 16.7 断熱材料
  - 16.7.1 概要
  - 16.7.2 開発動向
    - ① 物質・材料研究機構
- 16.8 ゴム
  - 16.8.1 概要
  - 16.8.2 開発動向
    - ① 住友ゴム工業
    - ② TOYO TIRE
    - ③ 横浜ゴム
- 17. MI 活用により作り出される高機能材料の市場規模予測

### 第3章 量子コンピュータ

- 1. 概要
- 2. 素材メーカーのための従来型コンピュータと量子コンピュータの使い方
- 3. 量子ゲート方式、量子アニーリング方式
  - 3.1 概要
  - 3.2 量子ゲート方式
    - 3.2.1 概要
    - 3.2.2 量子ゲート方式の代表的な実現方式の特徴
  - 3.3 量子アニーリング
    - 3.3.1 概要
    - 3.3.2 開発動向
    - 3.3.3 組み合わせ最適化問題
    - 3.3.4 ビジネス活用
    - 3.3.5 国内企業の量子コンピュータ研究開発の動向
- 4. 量子コンピュータ×AI
  - 4.1 概要
  - 4.2 量子コンピュータのAI 活用法
  - 4.3 教師あり学習 vs 教師なし学習
- 5. 開発動向
  - ① Google
  - ② IBM
  - ③ Microsoft
  - ④ 日本マイクロソフト
  - ⑤ D-Wave Systems
  - ⑥ Atos
  - ⑦ NEC
  - ⑧ 富士通

- ⑨ 東芝
- ⑩ 日立製作所
- ⑪ Rigetti Computing
- ⑫ QC Ware
- ⑬ Alibaba
- ⑭ 中国科学技術大学
- ⑮ 百度
- ⑯ Honeywell International
- ⑰ IonQ
- ⑱ IQM Finland Oy (IQM)
- 6. 大学の動向
  - 6.1 概要
    - ① 東北大学、東京工業大学
    - ② 大阪大学
    - ③ 東京大学
    - ④ 慶應義塾大学
    - ⑤ 早稲田大学
    - ⑥ 大阪市立大学
- 7. スーパーコンピュータ
  - 7.1 概要
  - 7.2 スーパーコンピュータと量子コンピュータ
  - 7.3 スーパーコンピュータの開発経緯
  - 7.4 開発動向
    - ① 理化学研究所
    - ② NEC
    - ③ Preferred Networks]
- 8. 量子ソフトウェア
  - 8.1 概要
  - 8.2 企業動向
    - ① IQB Information Technologies (IQBit)
    - ② Amazon Web Services
    - ③ フィックスターズ
    - ④ QunaSys
    - ⑤ Cambridge Quantum Computing (CQC)
    - ⑥ IQM Finland (IQM)
    - ⑦ テラスカイ
    - ⑧ 伊藤忠テクノソリューションズ
    - ⑨ Jij
    - ⑩ ABEJA
    - ⑪ Nextremer
    - ⑫ グルーヴノーツ
    - ⑬ blueqat (旧 MDR)
    - ⑭ ザイナス
    - ⑮ シグマアイ
- 9. 材料開発
  - 9.1 概要
  - 9.2 技術動向
  - 9.3 業界動向
  - 9.4 課題と対策
  - 9.5 企業動向
    - ① 三菱ケミカル
    - ② 旭化成
    - ③ 東レ
    - ④ JSR
    - ⑤ 三菱マテリアル、物質・材料研究機構
    - ⑥ QunaSys
    - ⑦ 東レリサーチセンター
    - ⑧ 京セラ
    - ⑨ ダイキン工業

- ⑩ 村田製作所
  - ⑪ プリヂェストン
  - ⑫ 物質・材料研究機構
  - ⑬ BASF
  - ⑭ 理化学研究所、物質・材料研究機構
  - ⑮ コーセー
  - ⑯ Zymergen
  - ⑰ CLAAS
10. 創薬
- 10.1 概要
  - 10.2 従来の医薬品の開発
  - 10.3 研究開発（創薬研究）の流れ
  - 10.4 医療診断
  - 10.5 計算創薬（in silico 創薬）
  - 10.6 AI 創薬
  - 10.7 開発動向
    - ① エーザイ
    - ② アステラス製薬
    - ③ Insilico Medicine
    - ④ Keobotix
    - ⑤ NAM
    - ⑥ 東レ
    - ⑦ インテージヘルスケア、理論創薬研究所、アフィニティ
- サイエンス
- ⑧ 神戸天然物化学
  - ⑨ BASF
  - ⑩ Merck
  - ⑪ Elix
11. 工場・物流
- 11.1 概要
  - 11.2 開発動向
    - ① デンソー
    - ② 富士通
    - ③ NEC
    - ④ 沖電気工業
    - ⑤ 住友商事
    - ⑥ アイシン精機
    - ⑦ 東邦ガス
12. 交通・渋滞・自動運転
- 12.1 概要
  - 12.2 業界動向
  - 12.3 開発動向
    - ① Volkswagen
    - ② Ford
    - ③ Daimler
    - ④ Rinspeed
    - ⑤ デンソー、豊田通商
    - ⑥ マツダ
    - ⑦ 富士通
    - ⑧ 東日本高速道路（NEXCO 東日本）
    - ⑨ BASF
13. 航空・宇宙機器
- 13.1 概要
  - 13.2 開発動向
    - ① NASA
    - ② Airbus
    - ③ Honeywell
    - ④ Lockheed Martin
14. 金融分野
- 14.1 概要
  - 14.2 業界動向
  - 14.3 企業動向
    - ① 日立製作所、損害保険ジャパン日本興亜
    - ② 三菱UFJ フィナンシャル・グループ
15. 新型コロナウイルス対策
- 15.1 概要
  - 15.2 開発動向
    - ① D-Wave systems
    - ② デンソー
    - ③ シグマアイ
16. その他の企業動向
- ① JXTG ホールディングス
  - ② リクルートコミュニケーションズ
  - ③ KDDI 総合研究所
  - ④ Intel
  - ⑤ 東北大学
  - ⑥ 理化学研究所、東京大学、ルール大学