

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

～AI×マテリアルズ・インフォマティクス×量子コンピュータを探る～

Digital Transformation for the Chemical Industry

- ▶ 豊富な資金力を持つGAF系企業が狙うAI×MI×量子コンで誕生する新素材開発とは！
- ▶ MI活用により作り出される高機能材料の市場規模予測！特に●●用途の割合が高まる！！
- ▶ 第一原理計算による、リチウムイオン電池やグラフェン、触媒などの材料別ケースを記述！
- ▶ データ不足問題を解決する、「スペースモデリング」が注目される背景とその応用を紹介！
- ▶ MIを活用した高分子材料、金属・無機材料の特徴と背景、ビジネス・開発動向を掲載！
- ▶ 半導体や誘電体材料、熱電変換材料など、MIの用途別適用事例、開発動向を記述！
- ▶ 近年、注目を集めている「逆合成解析」！AIと有機合成化学の開発動向を掲載！！
- ▶ 量子コンピュータ、量子ソフトウェアとマテリアル開発との関係、材料開発動向を詳述！

＜発行要項＞

- 発行：2020年8月11日発行
- 定価：冊子版 132,000円(税込)
セット(冊子+CD) 154,000円(税込)
- 体裁：A4判・並製・179頁
- 編集・発行：(株)シーエムシー・リサーチ
- ISBN 978-4-904482-85-8

＝ 刊行にあたって ＝

化学・素材メーカーのデジタルトランスフォーメーションの取り組みが新たな局面に入ってきた。特に、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)を導入・検討する企業が増えてきている。

従来のコンピュータでは不可能だった大規模、大量の計算を可能にするスーパーコンピュータを活用したりするもので、従来は何百日もかかる計算が数週間に短縮できたり、人間には思いもつかない組成の化学品をデザインできるといった成果が現実味を帯びつつある。

金属、無機、高分子などの材料がMIに利用される。物質、材料、構造、組織における関連性を明確にすることで、所望のパフォーマンスを起点として材料にさかのぼる形で最適化を見出すものとしても期待されている。

また、AI技術と計算力を活かせば、材料開発分野においても、AIは人間を凌駕する能力を発揮する。将来、AIの助けを借りて、従来にないスピードで新たな発見に導くMIが、材料開発の主要な潮流となってくるであろう。

さらに、MI時代では、化学・素材メーカーにとって、それを構成するスーパーコンピュータや量子コンピュータをいかに最適なものにするかということが重要になってくる。長期的にMI向け情報処理システムとして、特に期待されているのが量子コンピュータなのである。

根底の基本原則が同じである量子コンピュータは、素材開発との親和性が高く、既に広く利用されているAI技術にも、新たな可能性が誕生する。現在のAI技術は、機械学習によって学習を可能にしている。しかしながら、物事の文脈上の意味を理解する推論の能力が問われる問題については、古典コンピュータで実行するAIシステムにとっては複雑で処理が難しい。量子コンピュータを使うことで、この種の複雑さを処理できるようになる可能性があると考えられている。

これまでの材料探索は、研究者の経験と鋭い直感に依存していた。しかし、MIによって、物質特性をコンピュータ上で高精度に計算した材料データベースやAIなどを活用することにより、材料探索の時間とコストを大幅に削減できる。また、量子コンピュータを材料開発の新たな道具にするだけのスキルを備え始めており、将来、新素材が量子コンピュータによって瞬時に作り出せる可能性が出てくる。

本レポートでは、化学・素材企業等の実務担当者だけでなく、これからAIを使用した計算、MIを活用した材料開発、及び量子コンピュータを使用したい方にも参考になる構成にしている。

CMC リサーチ調査部

<p>目次</p> <p>1. 調査の背景</p> <p>2. 調査の目的</p> <p>3. 調査の範囲</p> <p>4. 調査の方法</p> <p>5. 調査の結果</p> <p>6. 調査の結論</p> <p>7. 調査の今後の展望</p>	<p>1. 調査の背景</p> <p>2. 調査の目的</p> <p>3. 調査の範囲</p> <p>4. 調査の方法</p> <p>5. 調査の結果</p> <p>6. 調査の結論</p> <p>7. 調査の今後の展望</p>	<p>1. 調査の背景</p> <p>2. 調査の目的</p> <p>3. 調査の範囲</p> <p>4. 調査の方法</p> <p>5. 調査の結果</p> <p>6. 調査の結論</p> <p>7. 調査の今後の展望</p>
--	--	--

注文書	メルマガ会員登録の登録	登録済み / 登録希望
品名	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	冊子版: 120,000円(税込132,000円) 冊子+CD: 140,000円(税154,000円) ※メルマガ会員は定価の10%OFF
会社名		
部課名		
お名前		
住所	〒	

お申込み・お問合せ
編集発行： (株)シーエムシー・リサーチ 101-0054 東京都千代田区神田錦町 2-7 東和錦町ビル3F
TEL: 03 (3293) 7053 FAX: 03 (3291) 5789 URL: https://cmcre.com E-mail: re@cmcre.com

*書籍はご注文を受けた翌営業日に納品書・請求書とともに送付します。*お支払いは請求書指定口座に納品日の翌月末日までに振り込みをお願いします。

構成および内容

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 基礎関数
- 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
- ①HACARUS ②バイエル薬品 ③大阪ガス ④東芝 ⑤DS 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 ⑥JSR ⑦日本触媒 ⑧東ソー ⑨ポリプラスチックス ⑩日油 ⑪NEC ⑫長瀬産業 ⑬旭化成、住友化学、三井化学、三菱ケミカル ⑭QuesTek Innovations
- 13.3 開発動向
- ①ユニカミノルタ ②昭和電工 ③Kyulux
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 ②JFE 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 ②UACJ 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 ②TRUST 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 ③BASF 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 ⑤MI-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 ③DIC
- 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
- ①NEC 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 ②TOYO 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
- ①Google ②IBM ③Microsoft ④日本マイクロソフト ⑤D-Wave Systems ⑥Atos ⑦NEC ⑧富士通 ⑨東芝 ⑩日立製作所 ⑪Rigetti Computing ⑫QC Ware ⑬Alibaba ⑭中国科学技術大学 ⑮百度 ⑯Honeywell International ⑰IonQ ⑱IQM 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 ②NEC ③Preferred Networks
8. 量子ソフトウェア
- 8.1 概要
- 8.2 企業動向
- ①IQB Information Technologies (IQBit) ②Amazon Web Services ③フィックスターズ ④QunaSys ⑤Cambridge Quantum Computing (CQC) ⑥IQM Finland (IQM) ⑦テラスカイ ⑧伊藤忠テクノソリューションズ ⑨Jij ⑩ABEJA ⑪Nextremer ⑫グルーヴノーツ ⑬blueqat (IBM 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 ④JSR ⑤三菱マテリアル、物質・材料研究機構 ⑥QunaSys 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ブリヂストン ⑫物質・材料研究機構 ⑬BASF ⑭理化学研究所、物質・材料研究機構 ⑮コーセー ⑯Zymergen ⑰CLAAS
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 ③Insilico Medicine ④Kebotix ⑤NAM ⑥東レ ⑦インタージェヘルスケア、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 ⑨BASF ⑩Merck ⑪Elix
11. 工場・物流
- 11.1 概要
- 11.2 開発動向
- ①デンソー ②富士通 ③NEC 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
- ①Volkswagen ②Ford ③Daimler ④Rinspeed 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) ⑨BASF
13. 航空・宇宙機器
- 13.1 概要
- 13.2 開発動向
- ①NASA ②Airbus ③Honeywell ④Lockheed 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
- ①D-Wave systems ②デンソー ③シグマアイ
16. その他の企業動向
- ①JXTG ホールディングス ②リクルートコミュニケーションズ ③KDDI 総合研究所 ④Intel ⑤東北大学 ⑥理化学研究所、東京大学、ルール大学