

「世界のマテリアルズ・インフォマティクス 最新業界レポート」 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. “理論・実験・計算・データ” 科学
8. 計算化学
 - 8.1 概要
 - 8.2 計算化学の種類
 - 8.3 基底関数
 - 8.4 計算科学とデータ科学
 - 8.5 計算化学とMIの融合
9. 第一原理計算
 - 9.1 概要
 - 9.2 量子化学計算
 - 9.3 第一原理計算を始めるには
 - 9.4 課題
 - 9.5 機械学習を第一原理計算に適用するケース
 - 9.6 第一原理計算を用いた材料別ケース
 - 9.6.1 概要
 - 9.6.2 グラフェン
 - 9.6.3 半導体材料
 - 9.6.4 誘電体材料
 - 9.6.5 LED 材料
 - 9.6.6 リチウムイオン電池材料
 - 9.6.7 触媒
 - 9.6.8 太陽電池
 - 9.6.9 液体界面
10. スパースモデリング
 - 10.1 概要
 - 10.2 スパースモデリングが注目される背景
 - 10.3 ディープラーニングの問題点
 - 10.4 応用例
 - 10.5 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 第一工業製薬
 - ⑦ 慶應義塾大学、東京大学
 - ⑧ 慶應義塾大学
11. 化学分野の人材育成

第3章 MI 支援サービス、及び関連企業

1. 概要
2. 開発動向
 - ① Microsoft
 - ② Mats2Market
 - ③ QuesTek
 - ④ Enthought
 - ⑤ JSR
 - ⑥ 出光興産
 - ⑦ TBM
 - ⑧ 東京エレクトロン
 - ⑨ レゾナック
 - ⑩ Schrödinger
 - ⑪ NVIDIA、Schrödinger
 - ⑫ Citrine Informatics
 - ⑬ Anlatan
 - ⑭ Mat3ra
 - ⑮ Phaseshift Technologies
 - ⑯ AIMateria
 - ⑰ 日立ハイテク
 - ⑱ Kebotix
 - ⑲ Johnson Matthey
 - ⑳ バルカー
 - ㉑ Innophore
 - ㉒ OntoChem
 - ㉓ Digital Science
 - ㉔ Scitara
 - ㉕ Revvity Signals Software (旧 ; PerkinElmer Informatics)
 - ㉖ Polymerize
 - ㉗ Materials Design
 - ㉘ Preferred Computational Chemistry (PFCC)
 - ㉙ Preferred Networks、ENEOS
 - ㉚ データケミカル
 - ㉛ SyntheticGestal
 - ㉜ アイデミー
 - ㉝ 伊藤忠テクノソリューションズ (CTC)
 - ㉞ QuesTek International
 - ㉟ NEC
 - ㊱ EAGLYS
 - ㊲ 大塚化学
 - ㊳ Biovia
 - ㊴ 長瀬産業
 - ㊵ 理化学研究所、物質・材料研究機構

第4章 MI の用途別開発動向

1. 高分子材料
 - 1.1 概要
 - 1.2 開発動向
 - ① 旭化成
 - ② 三菱ケミカル
 - ③ ダイセル
 - ④ 第一工業製薬、HACARUS
 - ⑤ Solvay
 - ⑥ Synthomer
2. 金属材料

- 2.1 概要
- 2.2 開発動向
 - ① 日立製作所
 - ② UACJ
 - ③ 東芝デジタルソリューションズ
 - ④ Citrine Informatics
 - ⑤ Intermolecular
 - ⑥ 大同特殊鋼
 - ⑦ Boeing
 - ⑧ アーヘン工科大学
- 3. 電池材料
 - 3.1 概要
 - 3.2 開発動向
 - ① パナソニック
 - ② サムスン電子
 - ③ シャープ
 - ④ MI-6
 - ⑤ Sion power
 - ⑥ 物質・材料研究機構、名古屋工業大学、トヨタ自動車
 - ⑦ Preferred Networks (PFN)、ENEOS
 - ⑧ 早稲田大学、富士通
 - ⑨ 日産自動車
 - ⑩ 物質・材料研究機構
 - ⑪ ソフトバンク
 - ⑫ Orbital Materials
- 4. 燃料電池
 - 4.1 概要
 - 4.2 開発動向
 - ① パナソニック
 - ② Johnson Matthey、Microsoft
 - ③ デンソー
 - ④ 東京大学
 - ⑤ 東京大学、金沢大学、九州大学、堀場製作所
 - ⑥ 大阪大学
- 5. 太陽電池
 - 5.1 概要
 - 5.2 開発動向
 - ① 豊田中央研究所
 - ② Ubiquitous Energy
 - ③ Tensor Energy
 - ④ 大阪大学
 - ⑤ 理化学研究所
- 6. 半導体
 - 6.1 概要
 - 6.2 開発動向
 - ① 東京エレクトロン
 - ② DIC
 - ③ 三菱ガス化学
 - ④ レゾナック
 - ⑤ Matmerize
 - ⑥ 東芝
 - ⑦ アルバック
 - ⑧ 関西学院大学、大阪大学
- 7. 触媒
 - 7.1 概要
 - 7.2 開発動向
 - ① Citrine Informatics
 - ② Preferred Networks (PFN)
 - ③ Toyota Research Institute、ノースウェスタン大学
 - ④ BASF
 - ⑤ 日本触媒
 - ⑥ 北海道大学
 - ⑦ 北陸先端科学技術大学院大学
 - ⑧ 富士通
 - ⑨ 東京ガス
- 8. セラミックス
 - 8.1 概要
 - 8.2 窒化ケイ素セラミックス
 - 8.3 開発動向
 - ① 産業技術総合研究所
 - ② 東京大学
 - ③ 横浜国立大学
- 9. 磁石
 - 9.1 概要
 - 9.2 元素戦略磁性材料研究拠点 (ESICMM)
 - 9.3 磁石マテリアルズオープンプラットフォーム (磁石 MOP)
 - 9.4 高効率モーター用磁性材料技術研究組合 (MagHEM)
 - 9.5 開発動向
 - ① トヨタ
 - ② TDK
 - ③ デンソー
 - ④ 東京理科大学、物質・材料研究機構 (NIMS)
 - ⑤ スタンフォード大学
 - ⑥ 物質・材料研究機構
- 10. ガラス
 - 10.1 概要
 - 10.2 開発動向
 - ① 東京大学
 - ② SLAC 国立加速器研究所、国立標準技術研究所 (NIST)、ノースウェスタン大学
 - ③ Lanxess
- 11. ゴム
 - 11.1 概要
 - 11.2 開発動向
 - ① 住友ゴム工業
 - ② TOYO TIRE
 - ③ 横浜ゴム
 - ④ 旭化成
- 12. 熱電変換材料
 - 12.1 概要
 - 12.2 開発動向
 - ① NEC
 - ② 東京大学
- 13. 断熱材料
 - 13.1 概要
 - 13.2 開発動向
 - ① 物質・材料研究機構
- 14. AI と有機合成化学
 - 14.1 概要
 - 14.2 開発動向
 - ① 大阪大学
 - ② TRUST SMITH
 - ③ 理化学研究所
 - ④ 東京大学、北海道大学、理化学研究所
- 15. ナノ粒子
 - 15.1 概要
 - 15.2 開発動向
 - ① 大阪大学

- ② コーネル大学
- ③ HRL Laboratories

16. リサイクル

16.1 概要

16.2 開発動向

- ① 日立製作所
- ② 東レ
- ③ TBM
- ④ Inobus

第5章 創薬・バイオ

1. 概要

- 1.1 従来の医薬品の開発
- 1.2 研究開発（創薬研究）の流れ
- 1.3 医療診断
- 1.4 計算創薬（in silico 創薬）
- 1.5 AI 創薬
- 1.6 ライフ インテリジェンス コンソーシアム（LINC）

2. 開発動向

- ① 日立ハイテクソリューションズ、慶応義塾大学
- ② 日立製作所
- ③ Bayer
- ④ 武田薬品工業
- ⑤ 大塚製薬
- ⑥ 小野薬品工業
- ⑦ 日油
- ⑧ SyntheticGestalt
- ⑨ Elix
- ⑩ PuREC
- ⑪ インテージヘルスケア、名古屋大学
- ⑫ Insilico Medicine
- ⑬ オスロ大学、シカゴ大学プリツカー医科大学
- ⑭ BioMed X、Sanofi
- ⑮ AION Labs
- ⑯ DenovAI
- ⑰ BenevolentAI
- ⑱ ConcertAI
- ⑲ CytoReason
- ⑳ Tempus
- ㉑ GlaxoSmithKline、Tempus
- ㉒ Microsoft
- ㉓ Oxford Biomedica
- ㉔ Google
- ㉕ DeepMind
- ㉖ GV
- ㉗ Valo Health、Novo Nordisk
- ㉘ Merck
- ㉙ Quris-AI
- ㉚ 大日本住友製薬
- ㉛ Roivant Sciences
- ㉜ Exscientia
- ㉝ レボルカ
- ㉞ 住友ファーマ
- ㉟ エーザイ
- ㊱ アステラス製薬
- ㊲ Kebotix
- ㊳ NAM
- ㊴ 東レ
- ㊵ 神戸天然物化学

- ④① BASF
- ④② Zymergen
- ④③ FRONTEO
- ④④ 九州大学

第6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. 量子技術・アプリケーション・コンソーシアム（QUTAC）」

6. QuPharma

7. 量子イノベーションイニシアチブ協議会

8. 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)
- ⑲ Seeqc
- ⑳ Pasqal
- ㉑ Quantinuum
- ㉒ Good Chemistry Company
- ㉓ QunaSys
- ㉔ 理化学研究所

9. 大学の動向

9.1 概要

9.2 開発動向

- ① 東北大学、東京工業大学
- ② 大阪大学
- ③ 東京大学
- ④ 慶応義塾大学

- ⑤ 早稲田大学
- ⑥ 大阪市立大学
- 10. スーパーコンピュータ
- 10.1 概要
- 10.2 スーパーコンピュータと量子コンピュータ
- 10.3 スーパーコンピュータの開発経緯
- 10.4 開発動向
 - ① 理化学研究所
 - ② NEC
 - ③ Preferred Networks

- 11. 量子ソフトウェア
- 11.1 概要
- 11.2 開発動向
 - 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

第7章 化学・素材産業における量子コンピューティングのユースケースの探求

- 1. 概要
- 2. 工程別に使用されるコンピュータシステム
- 3. 業界分析
- 4. 課題と対策
- 5. 開発動向
 - ① 三菱ケミカル
 - ② 三菱ケミカル、日本アイ・ビー・エム、JSR、慶應義塾大学
 - ③ 旭化成
 - ④ 東レ
 - ⑤ JSR
 - ⑥ QunaSys、PsiQuantum、JSR
 - ⑦ BASF
 - ⑧ レゾナック (旧; 昭和電工)
 - ⑨ トヨタ自動車
 - ⑩ 日本ゼオン
 - ⑪ 豊田中央研究所
 - ⑫ TOPPAN、大阪大学量子情報・量子生命研究センター (QIQB)
 - ⑬ Dow Chemical
 - ⑭ HyundaiMotor
 - ⑮ Mercedes-Benz
 - ⑯ Volkswagen Group、Xanadu
 - ⑰ BMW
 - ⑱ POSCO Holdings、Pasqal、Qunova Computing
 - ⑲ Merck
 - ⑳ 富士通、Atmonia
 - ㉑ Airbus、BMW Group
 - ㉒ Bosch

- ㉓ DIC
- ㉔ コーセー
- ㉕ 東レリサーチセンター
- ㉖ 物質・材料研究機構
- ㉗ Eni
- ㉘ E.ON
- ㉙ 京セラ
- ㉚ CLAAS
- ㉛ アイシングループ
- ㉜ Kyulux
- ㉝ SEMI ジャパン

第8章 電子実験ノート

- 1. 概要
- 2. 企業動向
 - ① 富士通
 - ② 横河電機
 - ③ BIOVIA
 - ④ ブルカー・ジャパン
 - ⑤ モルシス
 - ⑥ Thermo Fisher Scientific Inc
 - ⑦ Uncountable

第9章 企業のMI ビジネス戦略

- ① トヨタ
- ② デンソー
- ③ TDK
- ④ パナソニック
- ⑤ 第一工業製薬
- ⑥ コニカミノルタ
- ⑦ 三井化学
- ⑧ 三井化学、日本 IBM
- ⑨ 三井化学、日立製作所
- ⑩ 三井化学、CrowdChem
- ⑪ 住友化学
- ⑫ レゾナック (旧: 昭和電工)
- ⑬ JSR
- ⑭ TOPPAN (旧: 凸版印刷)
- ⑮ 日本ゼオン、アイデミー
- ⑯ 日本ゼオン
- ⑰ 本州化学
- ⑱ AGC
- ⑲ プロテリアル
- ⑳ 積水化学工業
- ㉑ 帝人
- ㉒ 花王
- ㉓ 日本ガイシ
- ㉔ Laboro. AI
- ㉕ カネカ
- ㉖ TBM
- ㉗ 積水化学工業、日立製作所
- ㉘ 三菱ガス化学
- ㉙ 日本触媒
- ㉚ 東ソー
- ㉛ ポリプラスチックス
- ㉜ 旭化成、住友化学、三井化学、三菱ケミカル
- ㉝ 旭化成
- ㉞ ENEOS
- ㉟ フジクラ

- ③⑥ 日本製鉄
- ③⑦ JFE スチール
- ③⑧ 神戸製鋼所
- ③⑨ 日本製鉄、JFEHD、神戸製鋼所
- ④⑩ DIC、感性AI
- ④⑪ 明治
- ④⑫ ライオン、日立製作所
- ④⑬ ライオン
- ④⑭ シード
- ④⑮ Dataiku
- ④⑯ 三重県工業研究所窯業研究室、伊藤忠テクノソリューションズ (CTC)

第10章 各国の取り組み

- 1. 概要
- 2. 米国
 - 2.1 概要
 - 2.2 Tox21
 - 2.3 nanoHUB
 - 2.4 量子コンピュータの動向
- 3. 中国

- 3.1 概要
- 3.2 中国のAI産業
- 3.3 量子コンピュータの動向
- 4. 欧州
 - 4.1 概要
 - 4.2 The European Materials Modelling Council (EMMC)
 - 4.3 Novel Materials Discovery (NOMAD)
 - 4.4 Materials Revolution Computational Design and Discovery of Novel Materials (MARVEL)
 - 4.5 EU-ToxRisk
 - 4.6 量子コンピュータの動向
- 5. 日本
 - 5.1 概要
 - 5.2 超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト (超超プロジェクト)
 - 5.3 マテリアルズ・オープン・プラットフォーム (化学MOP)
 - 5.4 MIInt (Materials Integration by Network Technology)
 - 5.5 AI-SHIPS (AI-based Substance Hazard Integrated Prediction System)
 - 5.6 日本医療研究開発機構 (AMED)
 - 5.7 環境省