

# 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

Materials Informatics

- ▶ Citrine Informatics や Enthought などの MI 支援サービス企業と日本勢との開発動向！
- ▶ MI を活用した高分子材料、電池材料、金属・無機材料の特徴、ビジネス動向を掲載！
- ▶ 第一原理計算による、リチウムイオン電池や半導体材料などの材料別ケースを記載！
- ▶ スパースモデリングが注目される背景、大学研究、及び、導入している企業を紹介！
- ▶ Microsoft や Google 等のビッグテックや、AI 搭載のソフトウェア企業の創薬事業とは？
- ▶ 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、材料開発を詳述！
- ▶ 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に関心が高まる！

## <発行要項>

- 発行：2024年1月12日
- 定価：本体(冊子版) 198,000円(税込)  
本体+CD(PDF版) 253,000円(税込)
- 体裁：A4判・並製・309頁
- 編集・発行：(株)シーエムシー・リサーチ
- ISBN 978-4-910581-48-4

## = はじめに =

マテリアルズ・インフォマティクス (MI) は、機械学習、実験、シミュレーション、データベース、クラウド・コンピューティングなどの領域の技術を組み合わせたもので、よりスピーディーに新素材を開発・商品化することが可能になっている。膨大な量のデータを高速に扱える環境が整ったことで、MI の利用が促進されている。

本レポートを刊行するにあたり、主に MI の用途別開発動向を調査した。例えば、高分子材料では、一般的には分子量が1万以上の化合物と定義され、名称が同じ材料であっても分子量や分子構造、製造プロセスの違いによって発揮される機能や効果が異なる。そのため、より正確に MI を適用するためにはそれらの違いを全てデータベース化することが求められている。しかしながら、分子構造や物性に関して、同条件の実験データを揃えることが困難であり、温度や混練条件等のプロセス条件による影響が大きいことから、高分子材料の MI の活用はさほど進んでいない状況である。

MI は、物質特性データベースと AI を活用して新素材を効率的に探索する手法として注目されている。これまで研究者個人のスキルに依存していた開発や検査のプロセスを、各社は同アプローチに基づいて高速化する取り組みを進めている。

新たな取り組みを始める際には、支援サービスなど外部の知見を活用するケースと、自社単独で全てこなすケースがある。近年、MI を初めて導入する場合には、支援サービスなど外部の知見を取り入れるメーカーが増えてきている。材料に対する知見は自社で確保できるが、適切な機械学習アルゴリズムの選定や機械学習に活用できるデータ形式の環境には、MI に関する専門知識が必要である。実際に、日本企業は、独 Mats2Market、米 QuesTek、米 Enthought、米 Citrine Informatics といった MI 支援サービス企業と提携し、素材開発の効率化に注力している。

さらには、大規模な分子を分析することが可能ということで、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にも関心が高まっている。現在、企業は従来のコンピュータで何億もの比較を実行しているが、実際に計算できる特定のサイズまでの分子のみに制限されている。量子コンピュータが実用化されれば、はるかに大きい分子を比較することが可能になり、膨大な数の化学物質の機能を調べるシミュレーションの短時間ができ、創薬の研究スピード向上と開発効率化が進んでいく。

本レポートは、マテリアルズ・インフォマティクスに関するビジネス・技術に関わる企業を主に調査した。今後の展開を見据えたうえで次世代ビジネスにつながるレポートになっている。

CMC リサーチ調査部

## 【本書の構成】

- |                          |                                      |
|--------------------------|--------------------------------------|
| 第1章 AI、機械学習、ディープラーニング    | 第6章 量子コンピュータ                         |
| 第2章 マテリアルズ・インフォマティクス(MI) | 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 |
| 第3章 MI 支援サービス、及び関連企業     | 第8章 電子実験ノート                          |
| 第4章 MI の用途別開発動向          | 第9章 企業の MI ビジネス戦略                    |
| 第5章 創薬・バイオ               | 第10章 各国の取り組み                         |

注文書		メルマガ 会員の 登録	登録済み / 登録希望	お申込み・お問合せ
品名	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	価格	本体(冊子版) : 180,000円(税込198,000円) 本体+CD(PDF) : 230,000円(税込253,000円) ※メルマガ会員は定価の10%OFF	編集発行： <b>(株)シーエムシー・リサーチ</b> 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 : <a href="https://cmcre.com">https://cmcre.com</a> E-mail : <a href="mailto:order_7053@cmcre.com">order_7053@cmcre.com</a>
会社名		TEL		
部課名		FAX		
お名前		E-mail		
住所	〒			

\*書籍はご注文を受けた翌営業日以降順次発送いたします。請求書は別途送付いたします。\*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でお願いします。

# 構成および内容 I

## 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
  - 9.7 触媒
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
- ①HACARUS②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
  - ①Microsoft ②MatsMarket ③QuesTek ④Enthought ⑤JSR ⑥出光興産 ⑦TBM ⑧東京エレクトロン ⑨レゾナック ⑩Schrödinger ⑪NVIDIA、Schrödinger ⑫Citrine Informatics ⑬Anlatan ⑭Mat3ra ⑮Phaseshift Technologies ⑯AI Materia ⑰日立ハイテク ⑱Kebotix ⑲Johnson Matthey ⑳バルカー ㉑Innophore ㉒OntoChem ㉓Digital Science ㉔Scitara ㉕Revvity Signals Software (旧;PerkinElmer Informatics) ㉖Polymerize ㉗Materials Design ㉘Preferred Computational

Chemistry (PFCC) ㉙Preferred Networks、ENEOS ㉚データケミカル ㉛SyntheticGestalt ㉜アイデミー ㉝伊藤忠テクノソリューションズ (CTC) ㉞QuesTek International ㉟NEC ㊱EAGLYS ㊲大塚化学 ㊳Biovia 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、HACARUS⑤Solvay⑥Synthomer
2. 金属材料
  - 2.1 概要
  - 2.2 開発動向
    - ①日立製作所②UACJ③東芝デジタルソリューションズ④Citrine Informatics⑤Intermolecular⑥大同特殊鋼⑦Boeing⑧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④MI-6⑤Sion power⑥物質・材料研究機構、名古屋工業大学、トヨタ自動車⑦Preferred Networks (PFN)、ENEOS⑧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⑫Orbital Materials
4. 燃料電池
  - 4.1 概要
  - 4.2 開発動向
    - ①パナソニック②Johnson Matthey、Microsoft③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②Ubiquitous Energy ③Tensor Energy④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②DIC③三菱ガス化学④レゾナック⑤Matmerize⑥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
    - ①Citrine Informatics②Preferred Networks (PFN) ③Toyota Research Institute、ノースウェスタン大学④BASF⑤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 元素戦略磁石材料研究拠点 (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②TDK③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②SLAC 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③Lanxess
11. ゴム
  - 11.1 概要
  - 11.2 開発動向
    - ①住友ゴム工業②TOYO TIRE③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
    - ①NEC②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②TRUST SMITH③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③HRL 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③TBM④Inobus

## 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、慶應義塾大学②日立製作所③Bayer④武田薬品工業⑤大塚製薬⑥小野薬品工業⑦日油⑧SyntheticGestalt⑨Elix⑩PuREC⑪インテージヘルスケア、名古屋大学⑫Insilico Medicine ⑬オスロ大学、シカゴ大学ブリツカー医科大学⑭BioMed X、Sanofi⑮AION Labs⑯DenovAI

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 慶應義塾大学 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 Hyundai Motor 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 バナソニック
- 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
- 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
- ㊵ DIC、感性AI ㊶ 明治 ㊷ ライオン、日立製作所
- ㊸ ライオン ㊹ シード ㊺ Dataiku ㊻ 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