



先端素材産業のイノベーションについて

JSR株式会社

2017年4月27日

@産業構造審議会 新産業構造部会

Contents

- **第4次産業革命**
 - **実現のKey Enablerは素材**
 - **機会の視点、脅威の視点**
- **製造業におけるデジタル化の方向性**
- **デジタル化によるRD変革**
- **自社の事例（フォトレジスト開発の例）**
- **非古典的コンピュータ出現に対しての構え**
- **実効性担保への課題**
- **2025年に向けての課題、および先端技術活用事例**

第4次産業革命実現のKey Enablerは素材

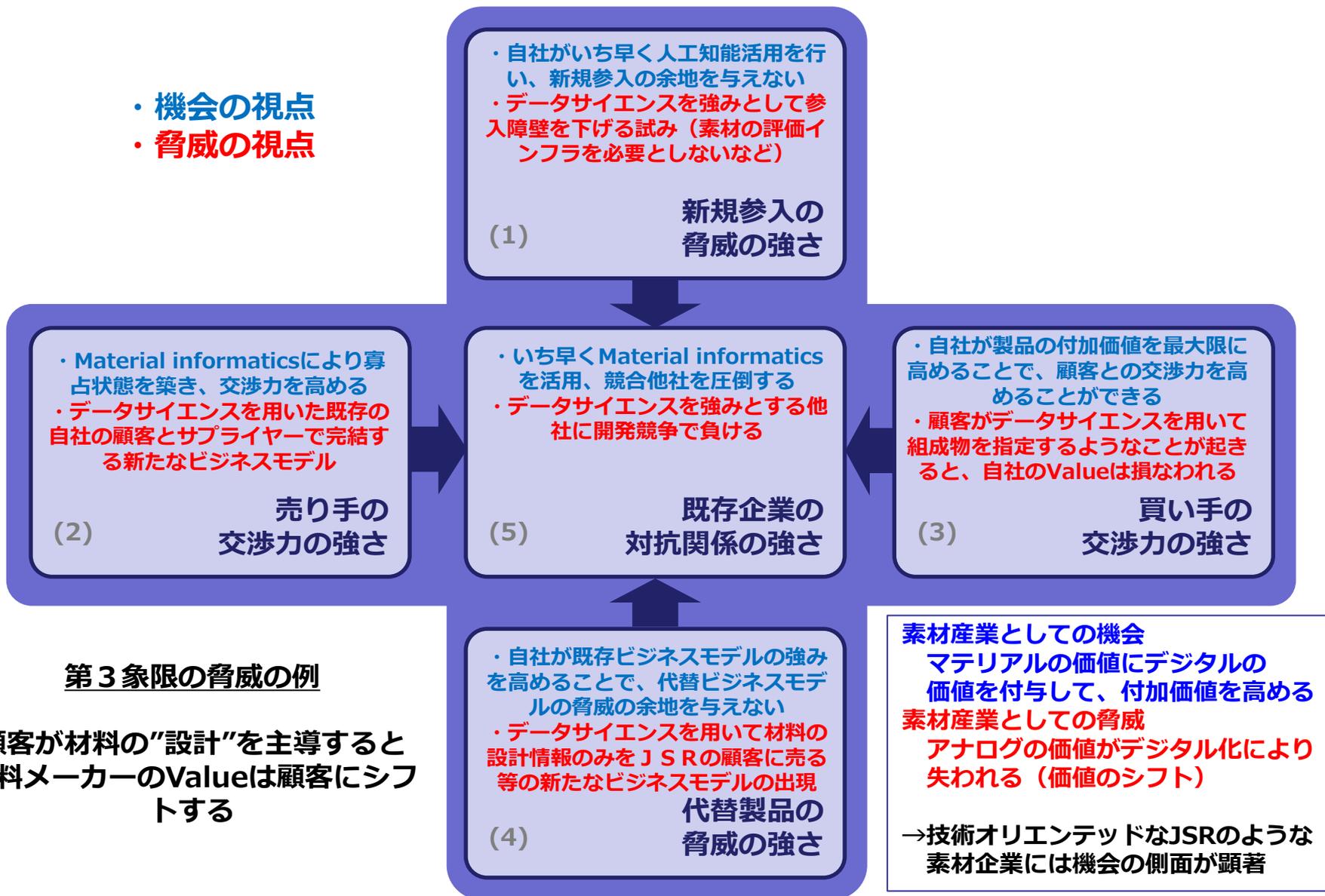
		Growth rates for key innovations	Examples of relevant products from Chemistry and Advanced Materials
MOBILITY	 Electric vehicles	Annual sales of electric vehicles 2020: 4.9 million	Plastics, composites and battery technologies
	 Drones	Market size for drones* 2015: \$10.1 billion 2020: \$14.9 billion	Plastics, composites and battery technologies
MOBILE & SMART DEVICES	 Smartphones and tablets	Mobile devices in use 2015: 8.6 billion 2020: 12.1 billion	Substrate, backplane, transparent conductor, barrier films and photoresists
	 Flexible displays (e.g. wearable devices, VR, TVs)	Market for AMOLED** displays 2016: \$2 billion 2020: \$18 billion	Substrate, backplane, transparent conductor, barrier films and photoresists
CONNECTIVITY & COMPUTING	 High-speed internet	Fixed broadband speed 2015: 24.7 Mbps 2020: 47.7 Mbps	Chlorosilane for ultrapure glass
	 More efficient and smaller integrated circuits	Processor logic gate length 2015: 14nm 2019: 7nm	Dielectrics, colloidal silica, photo resists, yield enhancers and edge-bead removers

World Economic Forum / Accenture
Digital Transformation Initiative Chemistry and Advanced Materials Industry "White Paper", 2017

素材産業にとっては自らの価値を高めるチャンス!

第4次産業革命の機会の視点、脅威の視点

- ・ 機会の視点
- ・ 脅威の視点



第3象限の脅威の例

顧客が材料の“設計”を主導すると材料メーカーのValueは顧客にシフトする

第4次産業革命のもたらす脅威の例 三星のIn silico高速スクリーニングの例

ARTICLES

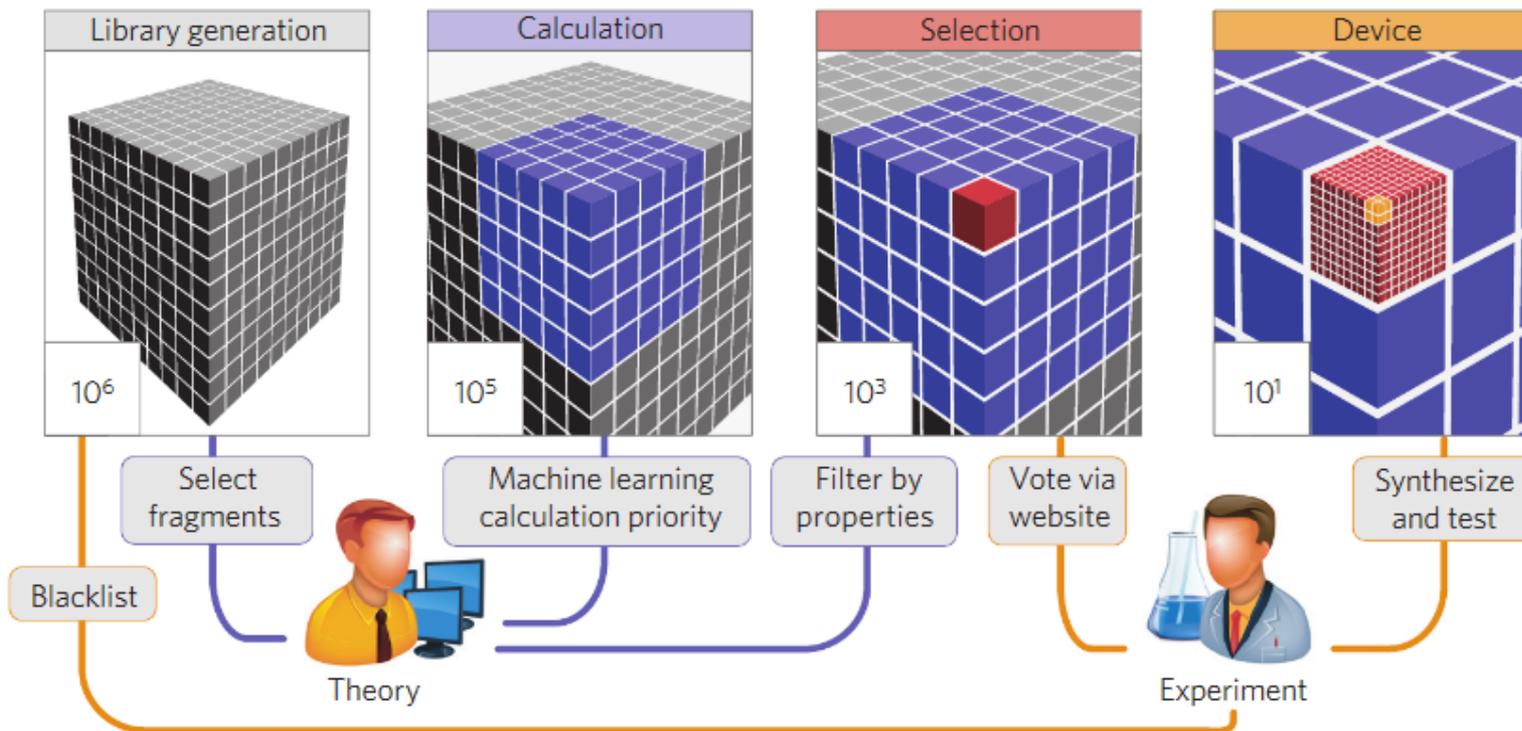
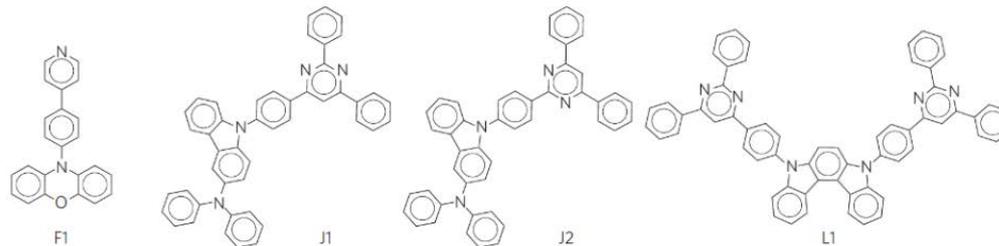
PUBLISHED ONLINE: 8 AUGUST 2016 | DOI: 10.1038/NMAT4717

nature
materials

Design of efficient molecular organic light-emitting diodes by a high-throughput virtual screening and experimental approach

機械学習を用いたVirtual Screeningスキーム

抽出された候補化合物



第4次産業革命のもたらす機会 JSRの手がけるKey Enablerの例

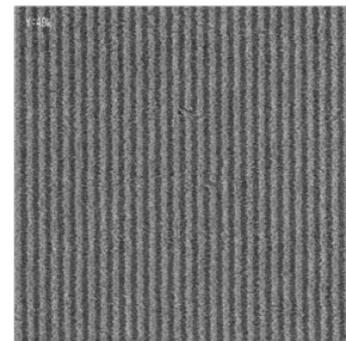
Carbon 3D



<http://www.carbon3d.com/>



EUVレジスト

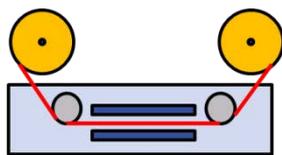


Resist 30nm
+Sensitizer UL (50nm)
350C60s bake, <math><9\text{mJ}/\text{cm}^2</math>

LiB Liブレード技術



Anode electrode roll sheet



Roll to roll lithiation process

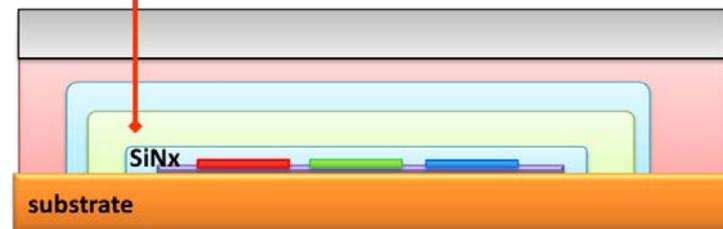


Lithiated anode electrode roll sheet especially for high energy density LiB etc

OLED塗布型バリア層

Thin film encapsulation material

- _ Interlayer to reinforce the barrier function of SiNx.
- _ UV-curable ink coated by inkjet printer.



素材産業としてのデジタル革命への構え

デジタル化後の方向性

マネジメント	意思決定の質および管理効率向上	<ul style="list-style-type: none"> AIを活用した情報管理（客観的情報のリアルタイムでの抽出等）
	自社プロダクトMixの質向上	<ul style="list-style-type: none"> デジタル技術を活用し、自社製品のValue propositionを高める
	人材	<ul style="list-style-type: none"> IT企業とのコラボレーション、コンソーシアム活用による教育 Digital Medicineの試用による健康経営
	ビジネストランスフォーメーション	<ul style="list-style-type: none"> 川下企業の取り込み（3Dプリンターの例）
製造	予知保全をベースとした稼働向上	IoT、Big data、AIにより予知（Predictive analysis）を高度化して、定修を代表とする期間基準メンテナンス(TBM)から状態基準(CBM)へ移行し、予防保全を万全として、プロセス固有の課題解決と合わせて稼働率を飛躍的に向上させる
	教育の高度化	稼働向上により、減少する非定常作業、異常事態対応能力について、VRやARの活用、AIやシミュレーションの活用によって安全水準を担保する。
	ユーティリティコスト削減	コンビナート全体で需給データや生産計画を共有して、ピークカットを行い、Utility costを最適化する
RD	研究開発の質の向上	<ul style="list-style-type: none"> 機械学習の材料開発への応用、量子コンピュータによる高度シミュレーションへの備え AIを活用した、テーマ選定・テーマ管理
	研究開発の量の向上	<ul style="list-style-type: none"> AIを活用した研究開発効率の飛躍的向上 AIを活用した非コア業務の効率化

今回の発表内容

材料開発におけるAIの適用事例

・電池寿命を6倍以上に伸ばすリチウムイオン電池の正極材料開発

革新的材料設計手法により超長寿命2次電池開発に成功 – 多数の高精度計算データを活用して材料開発を大幅に加速 –

http://www.kyoto-u.ac.jp/ja/research/research_results/2014/140730_1.html

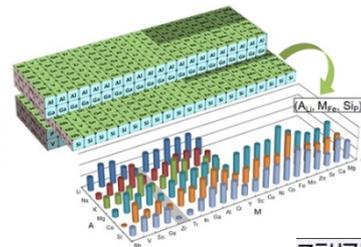


図: LiFePO₄の原子の一部を他の元素で置換した場合の体積変化の計算結果の一例。上部の長方形の各面に記載されている原子は、Liの置換元素(赤)、Feの置換元素(緑)、Pの置換元素(青色)を示しています。

・太陽電池や熱電変換材料に有望な新規物質の発見

豊田中央研究所が17万種類以上の物質から太陽電池と熱電変換の材料となる18種類の新物質を、いずれも従来にない短期間で発見

<http://newswitch.jp/p/1770>

マテリアルズインフォマティクスの運用イメージ



・従来の液体の電解質に代わる安全で長寿命の固体電解質を開発

MITと韓国サムスンの共同研究。2012年10月に、リチウムイオン電池で、過熱や発火の恐れのある従来の液体の電解質に代わり、安全かつ長寿命の固体電解質をマテリアルズ・インフォマティクスを用いて開発したと発表。それは日本の企業が以前より取り組み、2011年5月に特許出願(2012年11月公開)したのと同じ物質。米韓チームの短期間での成果は脅威。

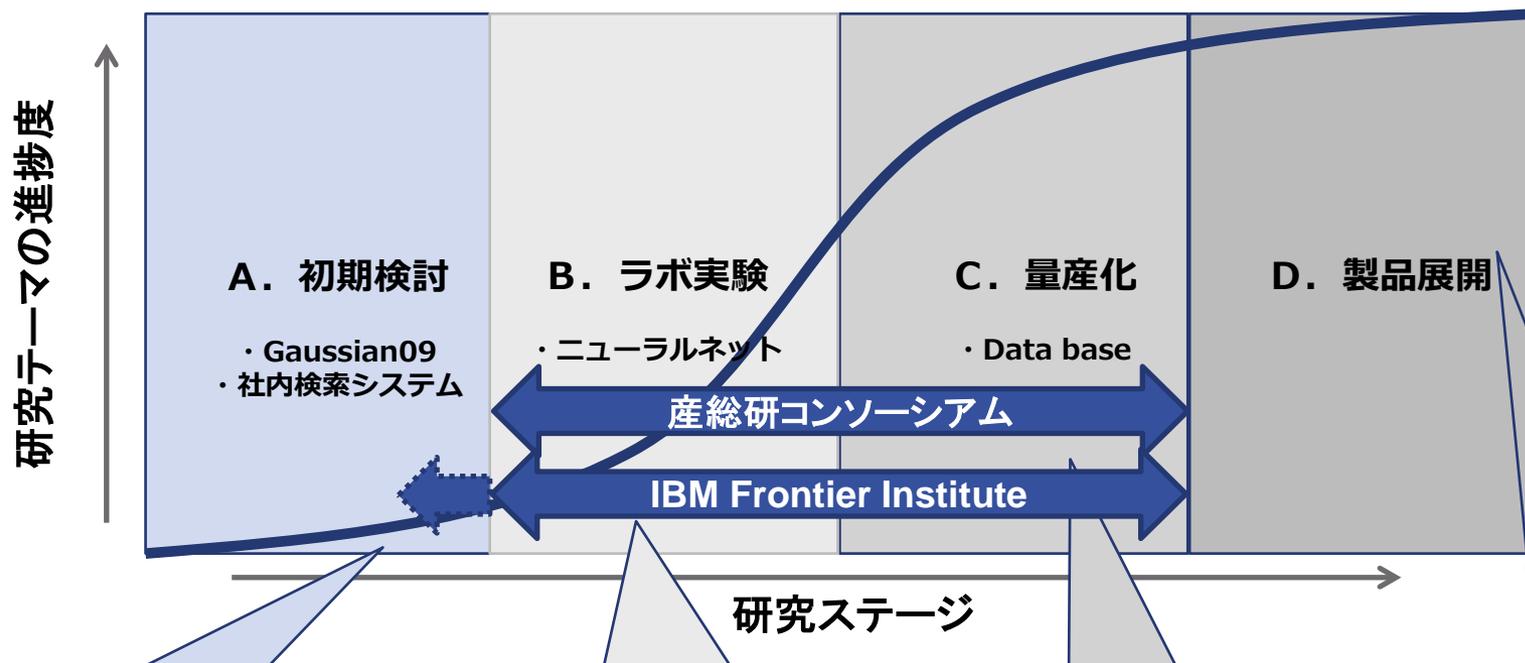
<http://www.itmedia.co.jp/smartjapan/articles/1508/21/news038.html>

・格子熱伝導度が低い化合物の発見 (Seko et al., Phys.Rev. Lett., 2015)

101個の化合物について第一原理計算した結果で機械学習し、Materials Project Database内の54779分子に対してスクリーニング。予測値の良かった8個について第一原理計算をして、5個がヒットした。

デジタルリゼーションによるRD変革

✓ 手戻りをなくすために、デジタル技術を活用して正しい設計指針を得ることが有用



- ・社内外の情報共有
- ・業界ニーズの取込み
- ・高いイノベーション
マインド醸成
- ・有望テーマの選定

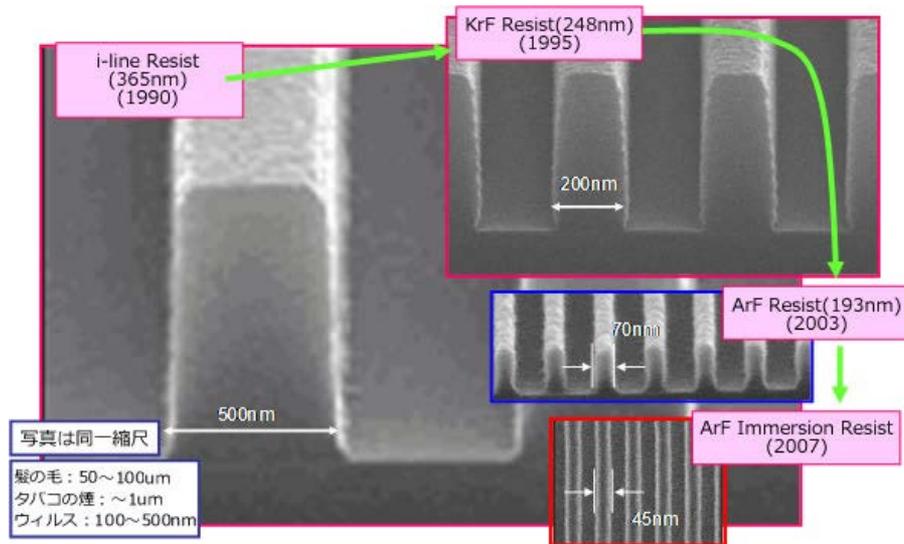
- ・多大な実験の効率化
- ・高い評価精度の実現
- ・適切な実験結果の判断
 - ・迅速な顧客提案
 - ・制約条件のクリア

- ・製造プロセスの確立
- ・安定生産の実現
- ・製造制約のクリア
- ・過去の失敗の回避

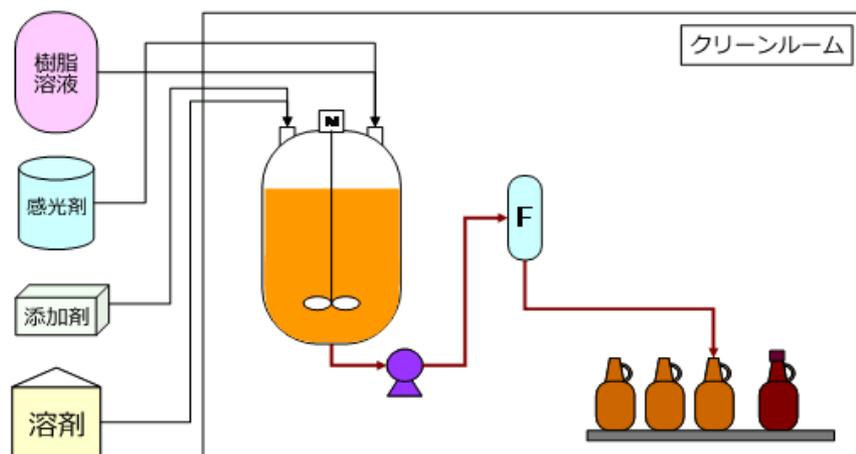
- ・拡販/用途展開の支援

デジタル技術活用の方向性 ; 1. JSR独自の情報共有化システム
2. データ活用による高度予測と検証

JSR製品の一例（フォトレジスト）



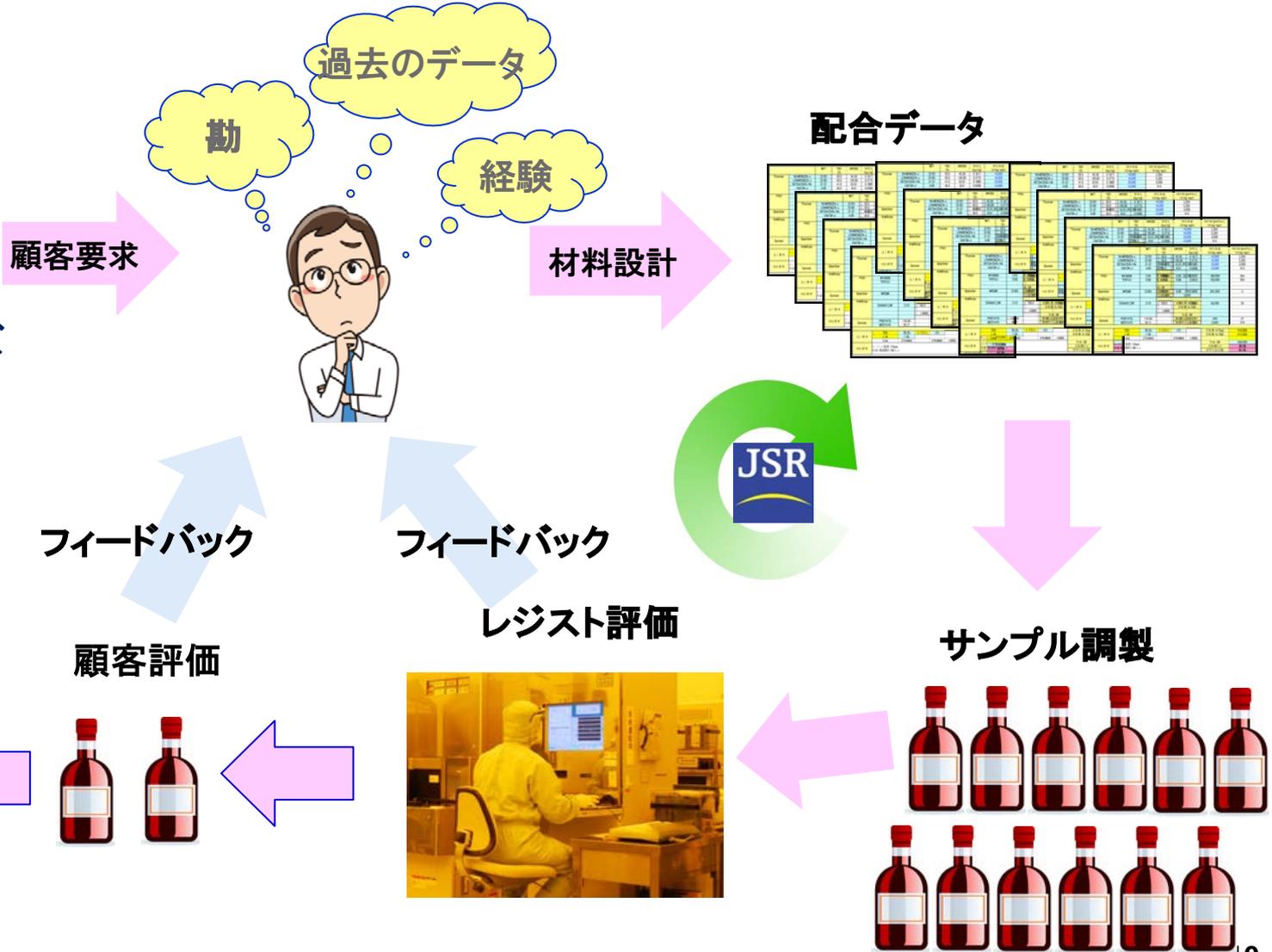
＜フォトレジストの製造プロセス＞



- ①原料準備 → ②溶剤・調製 → ③ろ過 → ④充填

材料開発フロー（これまで）

- 膜厚
- 基板
- 用途
- パターンサイズ
- 重要特性



機械学習の活用へのヒント



Chef Watson

IBM Watsonが料理データベースと基礎物性情報を学習し、要求キーワードに合う新規レシピを生成



実際にChef Watsonが考え出した料理

Filet Mignon Sauteed Meat

HERE'S A STARTING POINT...
6 servings

ALCOHOLIC BEVERAGE ½ cup cognac	DAIRY 5 cup whipped cream	FISH/SEAFOOD 5 oz cod
FLOUR flour	MEAT 1¼ lb filet mignon	OIL/FAT 4 tbsp coconut oil
STOCK/SOUP 1½ cup clam juice 1½ cup canned chicken broth	VEGETABLE ½ large sliced, peeled russet potato 1½ cup shredded, sliced, coréd savoy cabbage	

Based On Sauteed Veal With Shrimp, Mushroom, And Brandy Cream Sauce From Bon Appétit

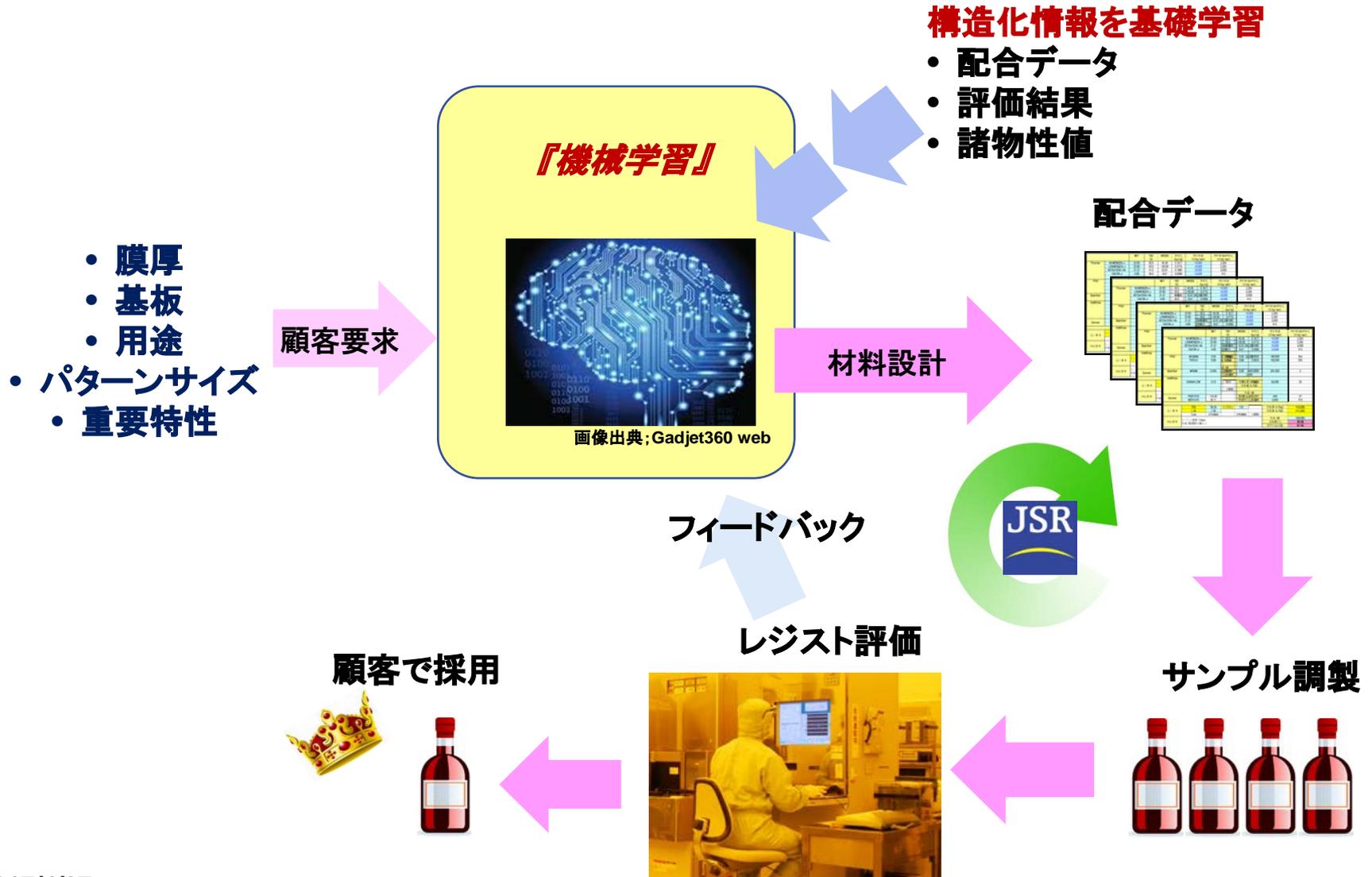
- Heat ½ of the coconut oil in heavy large skillet over medium-high heat. Add russet potato; saute. Add savoy cabbage; saute. Remove skillet from heat; add cognac. Carefully ignite; when flames subside, return to heat. Simmer. Add clam juice and chicken broth; boil 5 minutes. Add whipped cream; boil. Pour sauce into bowl; clean skillet.
- Place flour in shallow dish. Sprinkle filet mignon with salt and pepper; coat with flour. Heat the remaining coconut oil in same heavy large skillet over high heat. Add the filet mignon to skillet.



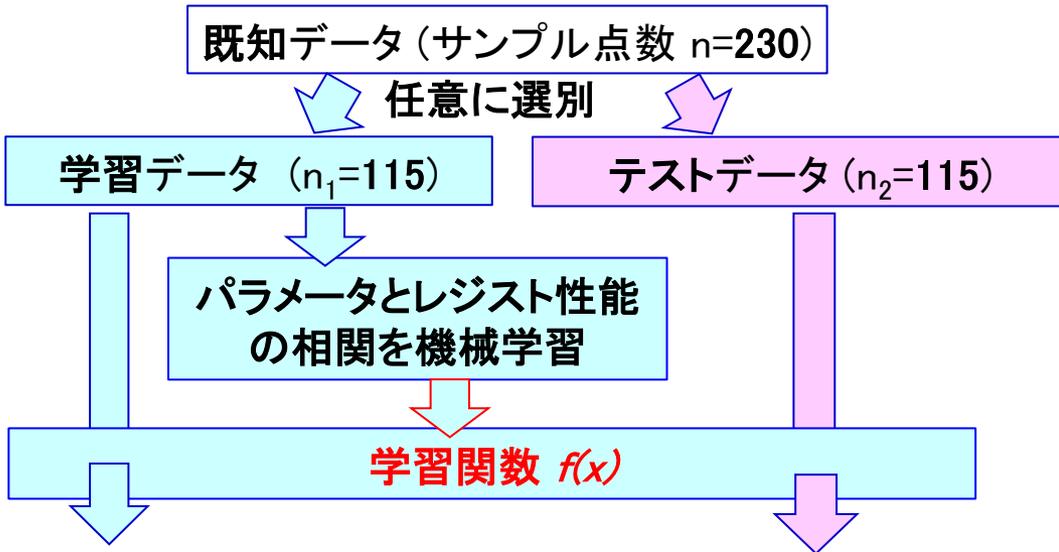
<https://www.ibmchefwatson.com/tupler>

東洋経済Online 2014年12月9日

材料開発フロー（理想）

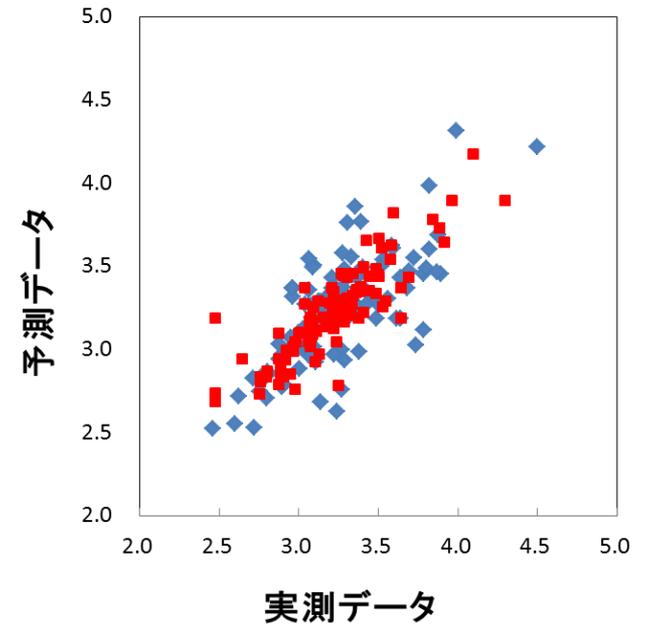
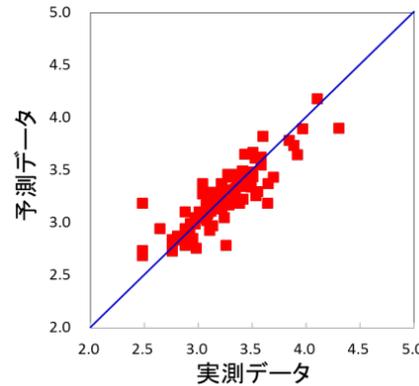
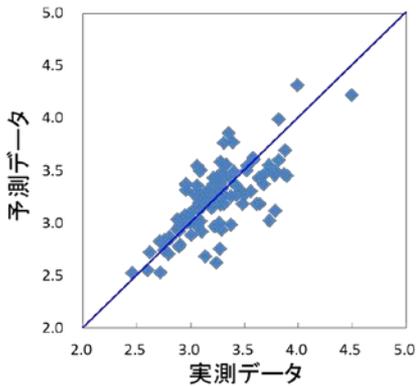


機械学習の検証



回帰モデル:
ニューラルネットワークによる
非線形回帰

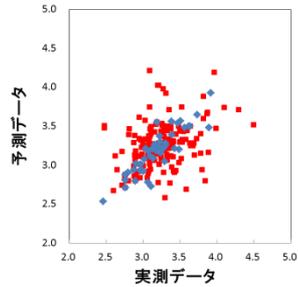
学習データ数 $n=115$
テストデータ数 $n=115$



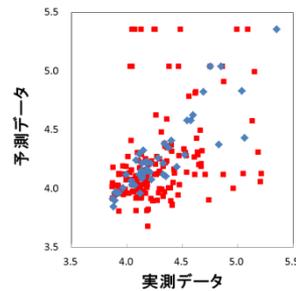
検証結果

学習データ
テストデータ

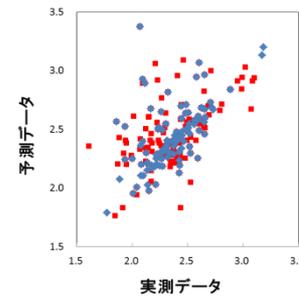
特性1



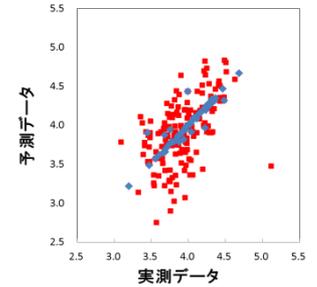
特性2



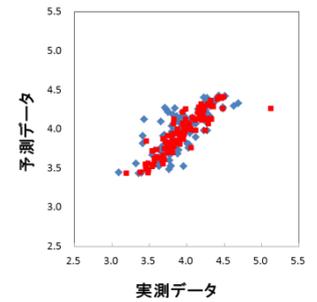
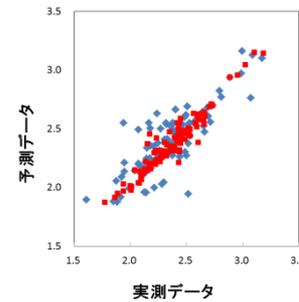
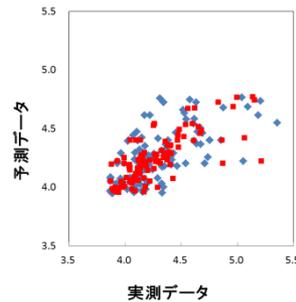
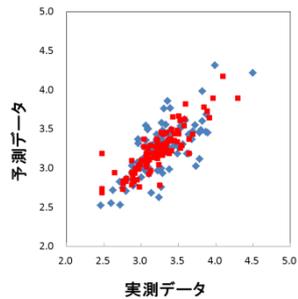
特性3



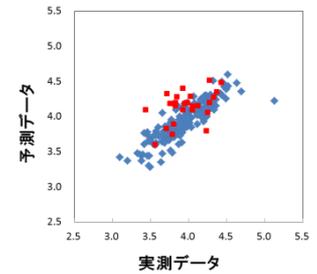
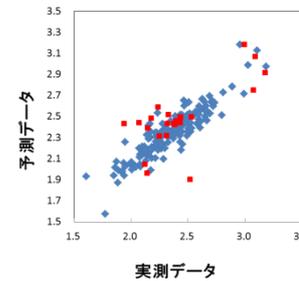
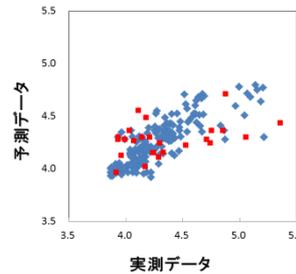
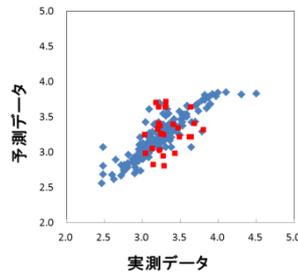
特性4



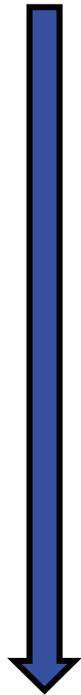
学習データ
n=50



学習データ
n=115



学習データ
n=200



学習データ増
予測精度良化

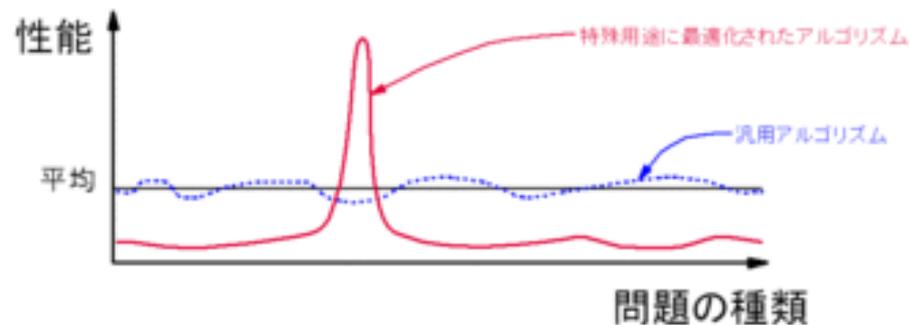
今後の技術課題

- 予測精度向上(最適アルゴリズム、記述子探索)
- データ規模の拡大
- 性能 ⇒ 化学構造の予測
- 実験の自動化
- 第一原理計算や機械学習モデル作成の計算リソース

No free lunch theorem

……コスト関数の極値を探索するあらゆるアルゴリズムは、全ての可能なコスト関数に適用した結果を平均すると同じ性能となる

— Wolpert and Macready, 1995年



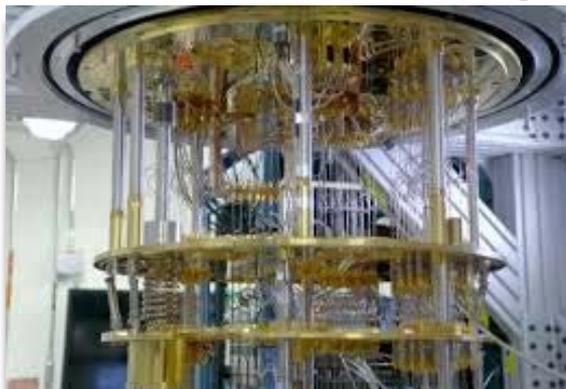
Wikipediaより

⇒ データサイエンティストによる最適化が必要 = 人材育成・確保必要

究極の姿) 非古典的コンピュータ出現に対しての構え

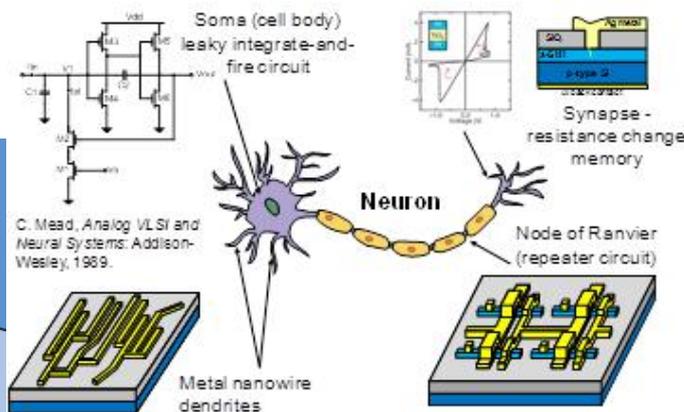
製造業としての量子コンピュータや脳模倣コンピュータの活用の準備を進めることが重要

Quantum Computing



第一原理計算にて革新的材料を開発
DL学習モデルの構築を高速化
データ検索速度の向上

Neuromorphic device



機械学習モデルを用いた
認識速度の向上

Cognitive Computing

Next Inflection Point: 2025?

<http://research.ibm.com/cognitive-computing/>
を元にJSRが加筆

オープンイノベーションの例 ～IBMとのプロジェクトのご紹介～

Founding members; Samsung, JSR, Honda, Hitachi Metals, Nagase, and Canon

Computing Reimagined

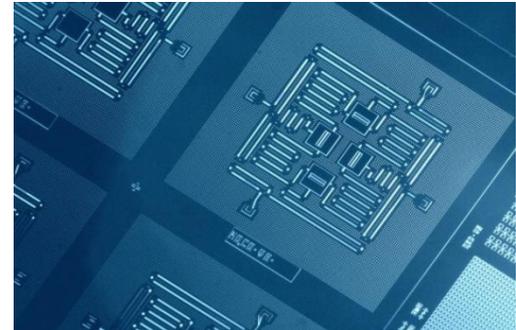
- Quantum Applications
- Neuromorphic Devices and Architectures
- Machine Intelligence

Data Experienced

- Internet of the Body
- Dataspaces
- Accelerated Materials Discovery

The Invisible Made Visible

- Microscopes
- Bioscopes
- Nanoscopes
- Hyperimager



IBMの量子コンピュータチップ



IBMの量子コンピュータ(外観)

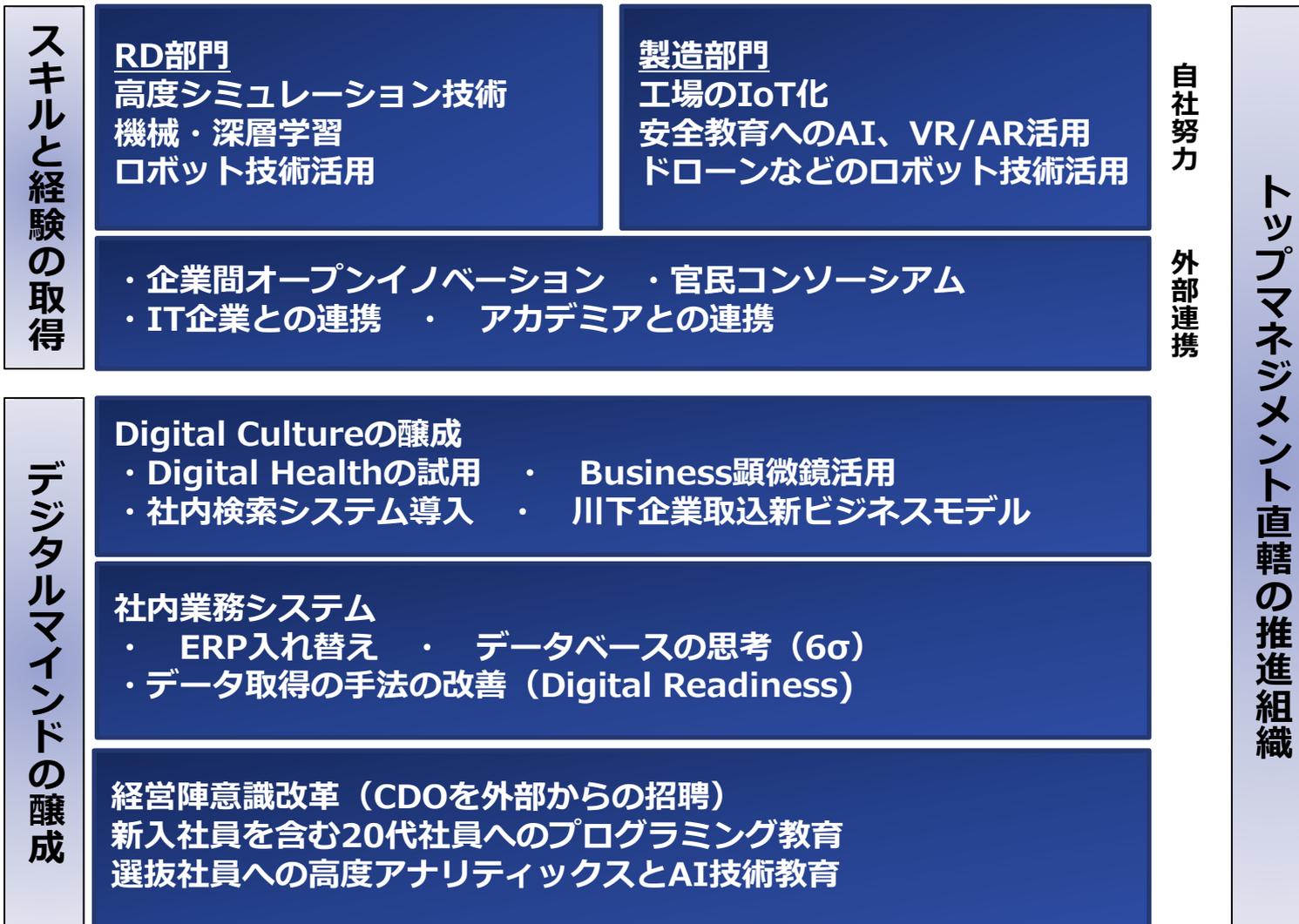
<http://www.research.ibm.com/frontiers>

のHPを元にJSRが編集

実効性担保への課題 ＜人材・環境整備＞

アイテム	課題の視点	素材メーカーとして準備すべきこと	政府への要望
ICT人材育成・確保	汎用アルゴリズムは限界あり データサイエンティストによる最適化必要	データサイエンティストの育成・登用 IT企業、コンソーシアム、アカデミアとの連携 CDO登用によるICTビジョン醸成	IT企業から製造業へIT人材の移動を促す施策
先進技術の使用環境整備	世間の新技術を即座にインストールできない	新技術にチャレンジし、適用効果を実証する(ドローン、モバイル・ウェアラブル端末、これらを支える無線通信など)	新技術導入の認可 データインフラの整備

2020年に向けてのDigitalizationへの備え (JSRの事例)



2025年を見据えた打ち手

①ホワイトカラー含む労働生産性向上

研究開発効率の10倍以上の改善: AIとロボット

製造部門へのICT技術取り組み: 工場のIOT化、安全教育へのAI、VR/ARの活用

②人材育成

AI技術者の育成(サイエンス・エンジニアリング系大学院卒以上の技術者への徹底したIT教育)

新入社員教育に外国語同様にプログラム言語の初級教育

③外部との連携による外部人材・技術取り込み

④経営陣、管理職、社員のデジタルマインドセット醸成

先進技術活用事例 ～無線通信、ドローン～

- ▶ 化学工場を始めとする製造現場は広く、人が全てを網羅するには限界がある。無線通信・ICT技術・ロボットなど先進技術を活用し、現場の管理強化、制御室とのコミュニケーション向上を図り、安全に貢献する、ミレニアル世代の台頭に合致したコミュニケーションツールの転換を図りたい。
- * 先進技術活用に関わる諸課題に対し、引き続き、政府の支援をお願いします。

無線通信による製造現場のスマート化

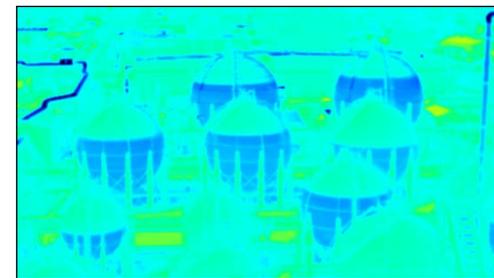
◆カメラ・端末による画像・音声など情報共有



無線通信における課題
 防爆、狭小エリア、データ容量
 セキュリティ、通信コスト

ドローン活用

◆(高所)設備点検・運転管理 ◆サーモカメラによる点検



ドローンにおける課題
 安全飛行(施設への衝突/
 墜落防止)、防爆、無線通信



先進技術活用事例 ～VR・AR～

1. 緊急対応力向上

危機対応訓練から、日常の危険予知活動までを、ARで現地・現物・現場を想定した条件で行い、ランダムなシナリオ、異常事態を仮想的に作り上げて実践的な訓練を行う。
設備不具合、情報錯綜、緊張、誤操作、誤判断が重なっても、安全を担保できるスキルを修得させたい。

2. 基礎教育

VRによって、基本動作訓練や習熟度テストなど繰り返しの標準基礎教育を行い、スキル管理まで行う

- 被液体感 -



- 巻き込まれ体感 -



ご清聴ありがとうございました

With chemistry, we can.

