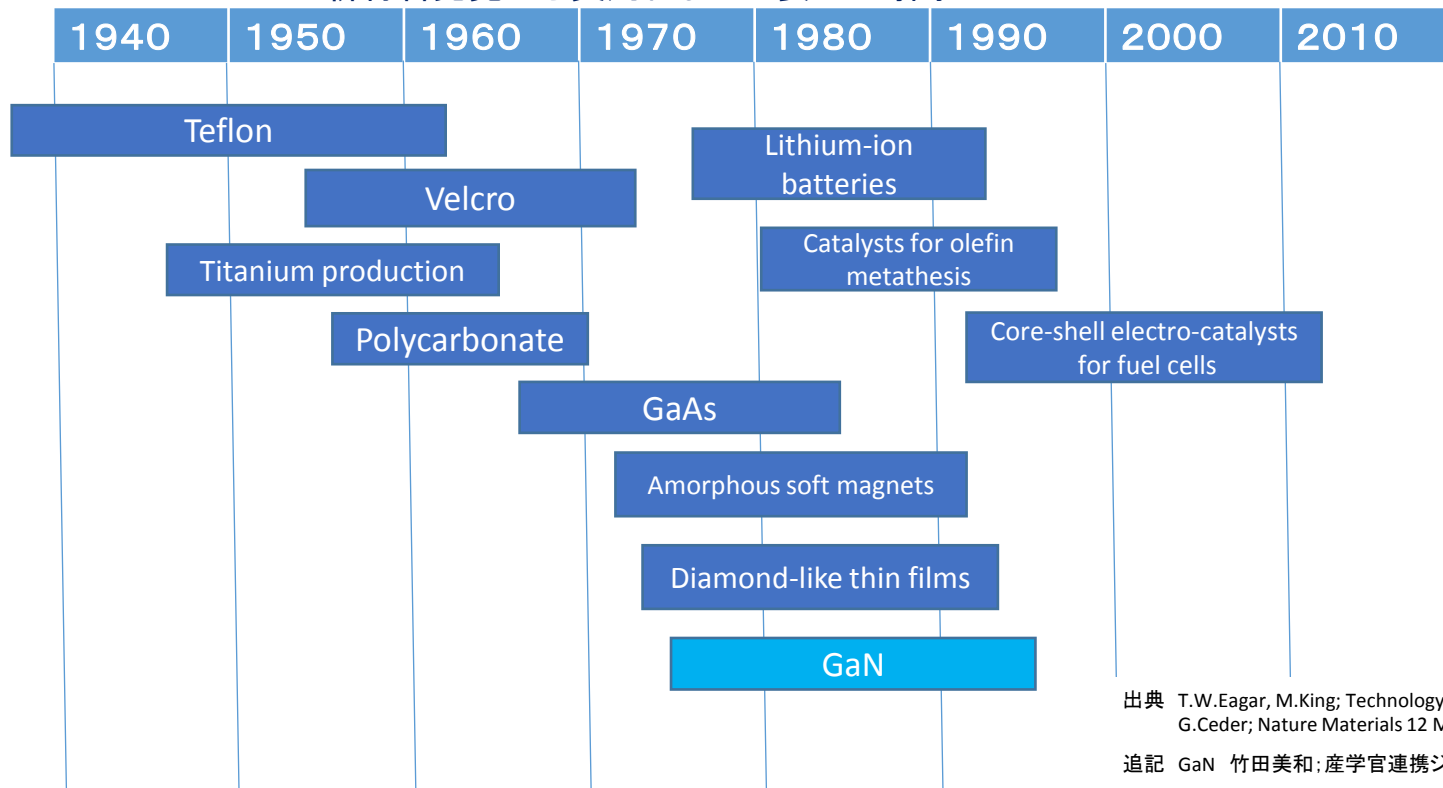


出口から見た MI²

期待と課題

材料発見から実用化までに平均18年 = > 半減

新材料発見から実用化までに要した時間



期間半減 = 開発スピード2倍: 特許、競争力で圧倒的有利
= 開発費用半減

企業から見た **MI²** に対する素朴な疑問

Q1. 本当にスピードアップできるのか？

研究投資資効果はあるのか？

Q2. データ共有問題

データは全部OPEN？

Q3. 入口はどこ？

どこから手をつけたらいいのか？

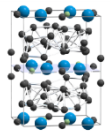
今日のお話 => 開発STAGEにより状況が違ふ

物質発見から実用化までの4ステージ

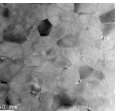
STAGE I 新物質創成 コンセプト、発見



STAGE II 物質の物性極値化 元素置換 ドープ



STAGE III 材料最適化 プロセス・組織構造の最適化



STAGE IV 適用研究開発 設計実証 信頼性



企業から見た **MI²** に対する素朴な疑問

Q1. 本当にスピードアップできるのか？

研究投資資効果はあるのか？

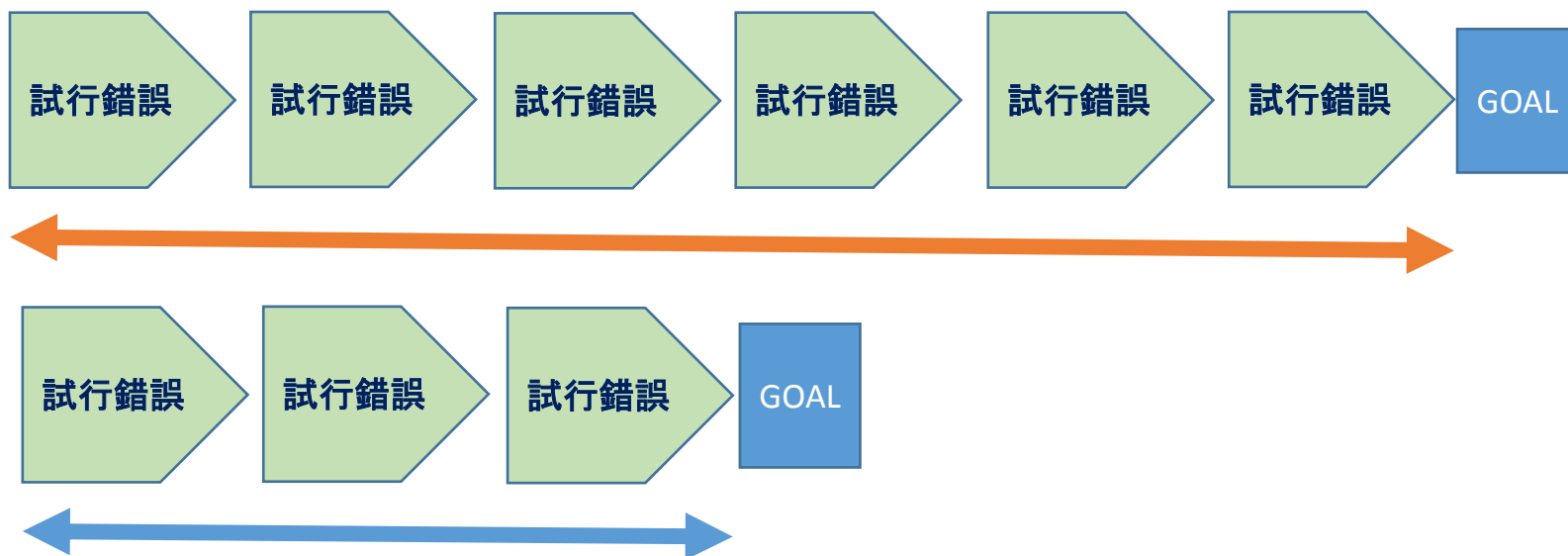
Q2. データ共有問題

データは全部OPEN？

Q3. 入口はどこ？

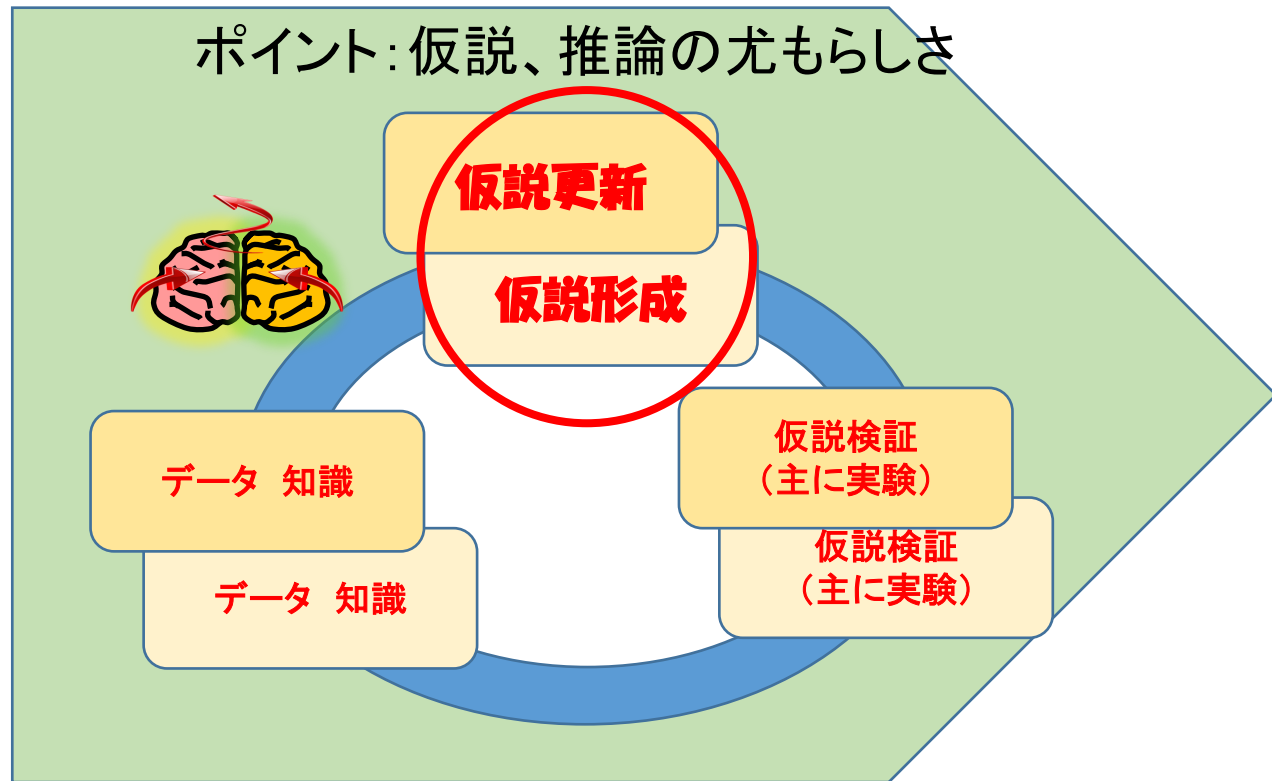
どこから手をつけたらいいのか？

試行錯誤の回数半減 → 開発期間の半減



■開発スピードUP 特許 競争力
■開発費用 半減

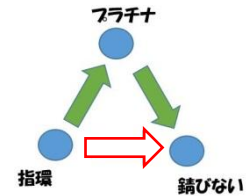
試行錯誤 = 仮説・検証のステップ。



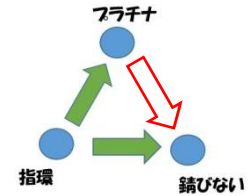
**仮説、推論の確度があがれば、
自ずと試行錯誤の回数は減るはず**

Charles Peirce 3つの推論形式

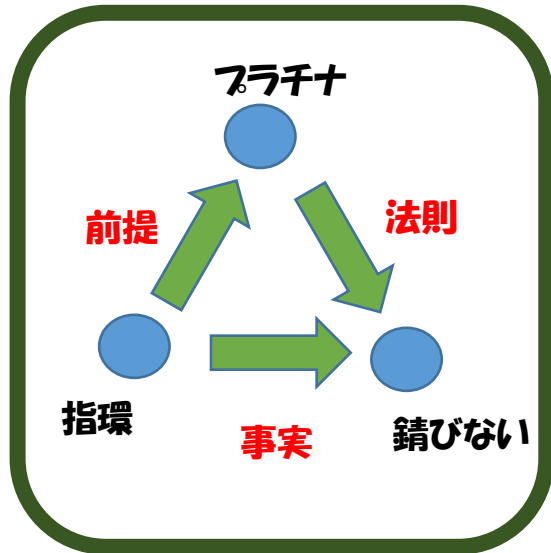
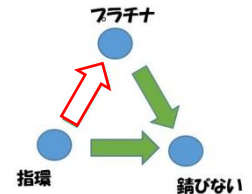
Deduction 演繹的推論



Induction 帰納的推論



Abduction 仮說的推論



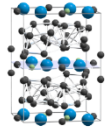
材料開発の各ステージにあてはめてみると

物質発見から実用化までの4ステージ

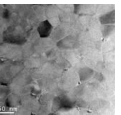
STAGE I 新物質創成 コンセプト、発見



STAGE II 物質の物性極値化 元素置換 ドープ



STAGE III 材料最適化 プロセス・組織構造の最適化



STAGE IV 適用研究開発 設計実証 信頼性



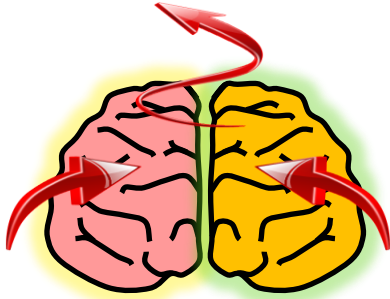
各STAGEの主な推論形式

	STAGE I 新物質創成 例) C ₆₀	STAGE II 物性極値化 Materials Genome	STAGE III 材料最適化 Integrated Computational Materials Engineering	STAGE IV 適用研究開発
内容	従来の特性限界超物質探索	結晶構造あり 元素置換 ドープ 極値を探す	材料化 プロセス・組織構造 の最適化	システム設計 試作実証 信頼性確保
ポイント	コンセプトひらめき 実験発見	傾向予測と実験	実験検証 特性トレードオフ克服	Virtual Prototype シミュレーション
主な 推論形式	Abduction	Deduction Induction	Induction	Deduction

レシピ+支配方程式

出口

仮説、推論過程でのMI²の期待効果



研究者の直観・ひらめき・経験知
(同時に思い込み、勘違い)

+

データ駆動(データ出発)

従来手法; SQC手法 実験計画法など

+

MI²

仮説(推論)の尤もらしさ

(1) **網羅的**

全幅探索

(2) **定量的**

高い信頼性

(3) **学習・進化**

機械学習、ベイズ

MI² で何が変わるのか？ その期待

STAGE I 物質発見の確率がアップ
研究者発想の補完；網羅的 学習進化

STAGE II STAGE III 期間短縮
試行錯誤回数の低減；より尤もらしい推論

STAGE IV 期間短縮
支配方程式が準備され
Virtual Prototypingが成立

企業から見た **MI²** に対する素朴な疑問

Q1. 本当にスピードアップできるのか？

研究投資資効果はあるのか？

Q2. データ共有問題

データは全部OPEN？

Q3. 入口はどこ？

どこから手をつけたらいいのか？

データ共有問題 OPEN / CLOSE

- ・ホットなデータ

競争下 OPENにできません

- ・ホットでないデータ OPENになりづらい

1) 手間 メタデータ、データ普遍性の確保

2) 機密 プロセスデータすべて記載

3) カルチャ 生データは誰のもの 個人?

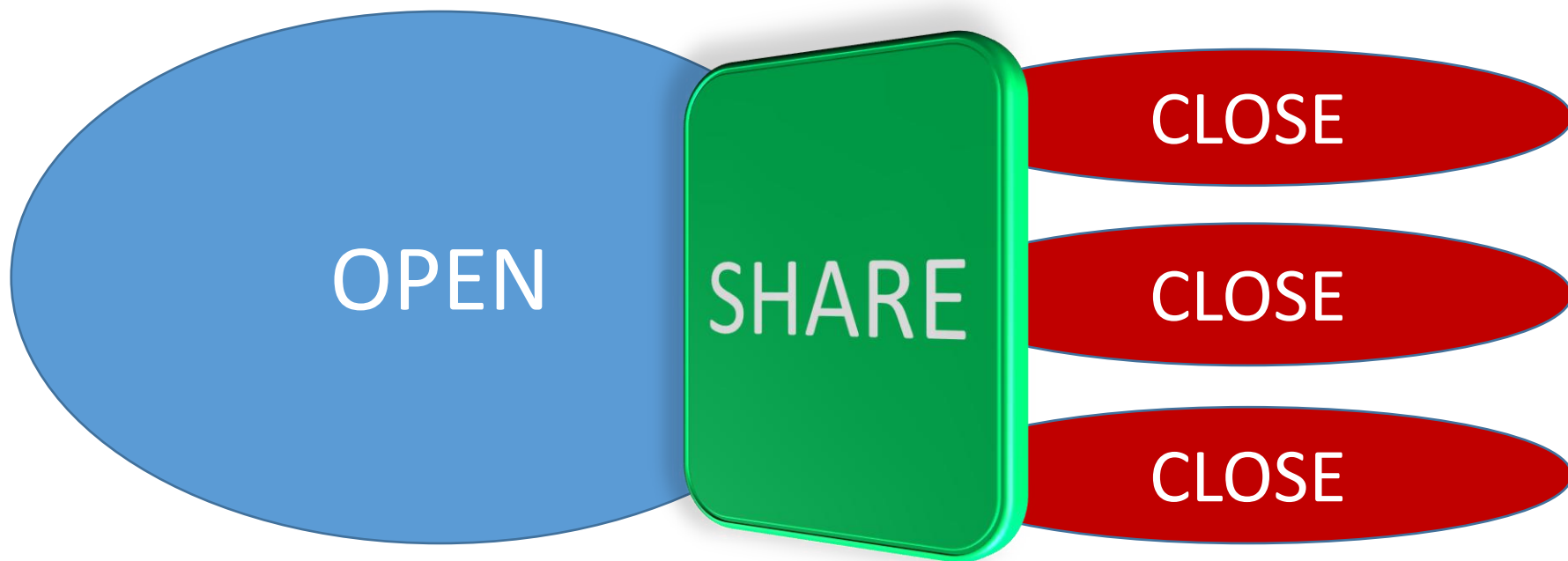
何らかの利得がないとOPENになりづらい

■ 利害の一致する小集団でのデータSHARE

OPEN / CLOSE から OPEN / SHARE / CLOSE

データ共有問題

OPEN・CLOSE + SHAREという選択



何らかの利得があればSHAREという選択も

データ OPEN CLOSE SHARE (利得戦略)

	STAGE I 新物質創成 例) C ₆₀	STAGE II 物性極値化 Materials Genome	STAGE III 材料最適化 Integrated Computational Materials Engineering	STAGE IV 適用研究開発
内容	従来の特性限界超物質探索	結晶構造あり 元素置換 ドープ 極値を探す	材料化 プロセス・組織構造 の最適化	システム設計 試作実証 信頼性確保
ポイント	コンセプトひらめき 実験発見 Abduction	傾向予測と実験 Deduction Induction	実験検証 特性トレードオフ克服 Induction主体	Virtual Prototype シミュレーション Deduction
データ共有	物質 Unknown 知識 OPEN	物質データベース OPEN (一部CLOSE) 新規物質 SHARE	特性CLOSE/OPEN プロセスCLOSE 現象解析 SHARE	固有材料CLOSE 一般材料OPEN 現象解析 SHARE 例) 疲労 クリーフ

レシピ + 支配方程式

出口

企業から見た **MI²** に対する素朴な疑問

Q1. 本当にスピードアップできるのか？

研究投資資効果はあるのか？

Q2. データ共有問題

データは全部OPEN？

Q3. 入口はどこ？

どこから手をつけたらいいのか？

課題はSTAGEで異なる

	STAGE I 新物質創成 例) C ₆₀	STAGE II 物性極値化 Materials Genome	STAGE III 材料最適化 Integrated Computational Materials Engineering	STAGE IV 適用研究開発
内容	従来の特性限界超物質探索	結晶構造あり 元素置換 ドープ 極値を探す	材料化 プロセス・組織構造 の最適化	システム設計 試作実証 信頼性確保
ポイント	コンセプトひらめき 実験発見 Abduction	傾向予測と実験 Deduction Induction	実験検証 特性トレードオフ克服 Induction主体	Virtual Prototype シミュレーション Deduction
データ共有	Unknown OPEN 知識	OPEN 一部CLOSE 物質データベース	特性CLOSE/OPEN プロセスCLOSE	固有材料CLOSE 一般材料OPEN
MIの期待	逆問題 特性→構造予測	結晶構造・特性相関 QSPR	特性・組織相関 プロセス・組織相関	短期間化 (時間、費用)
課題	方法論研究	事例研究 手法選択	組織構造データ化 データ形式統一 (メタデータ)	各種シミュレーション

レシピ + 支配方程式

出口

企業から見た **MI²** に対する素朴な疑問

Q1. 本当にスピードアップできるのか？
仮説の確度UPなら試行回数減

Q2. データ共有問題
SHAREという選択の活用

Q3. 入口はどこ？ どこからでも可
STAGE I ~ IVで課題が異なる

MI²I 情報統合型物質・材料開発 イニシアティブ

“Materials research
by Information Integration” Initiative

