

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

磁石材料プロセス

by 広沢 哲

