

# オンデマンド材料開発を目指した材料設計システム

## — 開発現場から生まれた新規な材料設計手法 —

稲田 禎一<sup>1\*</sup>、松尾 徳朗<sup>2</sup>

最先端の半導体用材料の開発現場では、毎月のように新しい材料を開発しなくてはならない。開発期間の短縮を目的に、線形計画法、組合せ最適化、グラフ理論等をベースに独自の材料設計支援システムを構築した。このシステム（弱条件組合せ線形計画法）により、複数の特性を満たす配合候補を見出すことが可能になった。また、複素特性値やクリープ等の時系列特性を含む材料の最適化にも適用可能であるほか、供給リスク計算等も開発時に行えるようになった。この手法を活用することで目標値を満たす材料を効率的に開発することが可能になった。

キーワード：線形計画法、組合せ最適化、オンデマンド開発、材料設計

## A novel material design method for on-demand material development

### – A method born from a development field –

Teiichi INADA<sup>1\*</sup> and Tokuro MATSUO<sup>2</sup>

Advanced materials for the semiconductor industry are being developed every month. To reduce the development period, we constructed a novel material design method based on linear programming, combinatorial optimization, and graph theory. This method (called weak conditioned combinatorial linear programming) enabled us to find composition candidates that satisfy a number of properties at the same time. By defining the solution area as a function of the combination index, the optimum formulations were acquired. This optimization could be done by newly developed user-friendly software. This system is applicable to optimization of materials with complex properties and time-series properties such as creep. The method enabled us to develop materials satisfying target values efficiently.

Keywords: Linear programming, combinatorial optimization, on demand development, material design

### 1 はじめに

材料開発には長期間の地道な研究と偶然の発見を見逃さない洞察力（セレンディピティ）が何より大切である。この正論に異を唱えるつもりはないが、一方で、最先端の半導体用材料の開発現場では、毎月のように新しい材料を開発しなくてはならない。画期的な新材料の完成や偶然の発見を待っている余裕はなく、すでにある材料を組み合わせて、期限内にどうにかして目標値を満たすように悪戦苦闘しているのが現実である。このような業務に携わる研究者はどのようなスタイルで開発を進めればよいのであろうか。

このような材料開発は、持ち合わせの素材を職人芸で巧みに組み合わせて作ることが多いことから、レヴィ＝ストロースの言うブリコラージュ（器用仕事）<sup>[1][2]</sup>の範疇に入るかもしれない。

しかし著者らは10年以上にわたり超短期間開発のテー

マをこなしていくうちに、単なるブリコラージュではなく、合理的な設計をして、確実に目標値を満たす材料を開発したいと考えるようになった。この考え方はブリコラージュの対比概念であるエンジニアリング（必要な道具をそろえて、設計図通りにもものを作るものづくりの仕方）に近い。いわば、ブリコラージュの現実的で器用な面とエンジニアリングの合理的設計のメリットを併せ持つ開発手法を構築したいと考えたのである。

これまでの一般的と思える材料開発のスタイルと著者らが考えたスタイルの比較を図1に示す。通常材料研究は飛び抜けた特性を持つ画期的な材料を見出すことを目的に行われる。この論文の研究スタイルはすでにある材料を組み合わせて材料設計することであり、飛び抜けた性能を追求していない。例えば半導体パッケージ製造プロセスの中では、流動性や粘着性等多様な目標特性があるが、そ

1 日立化成(株)筑波総合研究所 〒300-4247 つくば市和台48、2 公立大学法人首都大学東京 産業技術大学院大学 〒140-0011 品川区東大井1-10-40

1. Hitachi Chemical Co., Ltd. Tsukuba Research Laboratory 48 Wadai, Tsukuba 300-4247, Japan, 2. Industrial Technology Graduate Course of Information Systems Architecture, Advanced Institute of Industrial Technology 10-40-1 Higashi-Ooi, Shinagawa-ku 140-0011, Japan \* E-mail: t-inada@hitachi-chem.co.jp

Original manuscript received March 28, 2013, Revisions received September 3, 2013, Accepted September 3, 2013

それぞれの特性がある範囲にあることが重要であり、飛び抜けて良い特性は必要とされないからである。

このような材料開発の進め方は、極めて短時間のうちに完了することを最大の特徴としているので、この論文ではオンデマンド材料開発と呼ぶ。以下に著者らが確立したオンデマンド材料開発手法のコンセプトと実際の適用結果について順を追って説明したい。

## 2 研究の背景

スマートフォンやタブレット端末、超薄型ノートPCやクラウドを支えるサーバー等、最先端の電子機器は常に進化しており、この心臓部である半導体素子、半導体パッケージも進化し続けている<sup>[3]</sup>。

図2に示す半導体パッケージには種々の材料が使用される。半導体パッケージは若者を中心とする消費者の嗜好や流行(例えばスマートフォン等の小型化や記憶容量拡大等)に応じて構造が変わるため、技術進化の動向が予測しにくいという特徴がある。例えば半導体チップと支持体間の接着に使用される半導体用接着材料(ダイボンディングフィルム)<sup>[4][5]</sup>の必要特性も毎月のように変化している。

半導体パッケージの組立プロセスは図3のように多岐にわたっており、プロセス毎に種々の特性が要求される。共通で要求される特性は、

- (1) 80℃以下の温度で流動し、ウエハを接着できること。
- (2) チップと実装基板間等の接着に使用されるため、それらの熱膨張係数の差を吸収し、応力緩和できること。
- (3) 半導体パッケージを配線基板に接続するためのほとんどは融工程(260℃程度)で流動や剥離が生じないことなどがあるが、それ以外にも多数の要求がある。新規な構造の開発当初は半導体メーカーでさえ材料の必要特性が分からない場合が多い。むしろいろいろな材料を評価しな

がら、目標値を明確にしてゆくのである。

材料の開発期間は短いものでは数か月間であるが、ポリマー等の新素材を数か月のうちに合成し、最終的にフィルム等の形で提供することは極めて困難である。

一方で、最先端の半導体産業では極めて多額の設備投資を行い、短期間で回収し、さらに次世代向けに投資しなければ、生き残っていけないことがよく知られている。最先端の半導体産業においては、競争力を強化するため、また投資リスクを抑えるためにも、材料の早期開発のための合理的な設計手法、最適化手法に対する要求が強まっている。

従来検討されていた数理的最適化手法としては、線形計画法、非線形計画法、組合せ最適化等がある<sup>[6]-[9]</sup>。材料設計にもこれらの手法の応用が期待されるが、材料開発に役立てるには、以下のいくつかの課題がある。

- (1) 数多くの化学素材の中から、最適な組合せを選ぶ必要があるが、実際には、素材を保管・混合するタンク数、廃液パイプ数等の制約、自然災害や工場の事故などによる素材の供給停止リスク等により、使用する素材の数は限られる。
- (2) 他社特許の制約等があり、制約関数が複雑になるため、解の候補集合が凸集合でない場合がある。

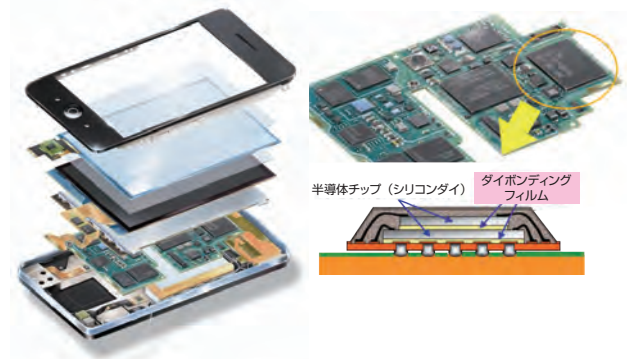


図2 電子機器と半導体パッケージの一例

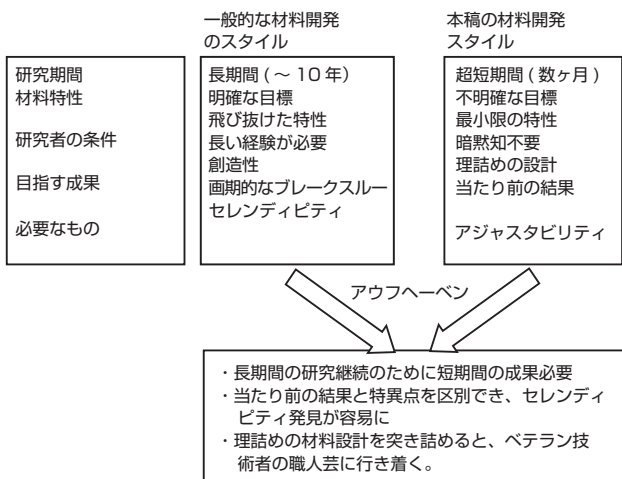


図1 これまでの材料開発のスタイルとこの論文のスタイルの比較

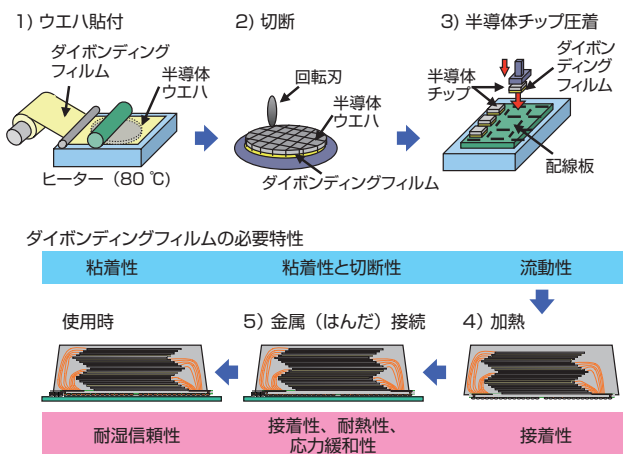


図3 半導体パッケージの組立プロセス

(3) 粘接着剤の設計には、複素弾性率等の複素物性の最適化が必須であるが、これまでの数理設計は実ベクトル空間を対象としており、複素数の取り扱いが困難である。

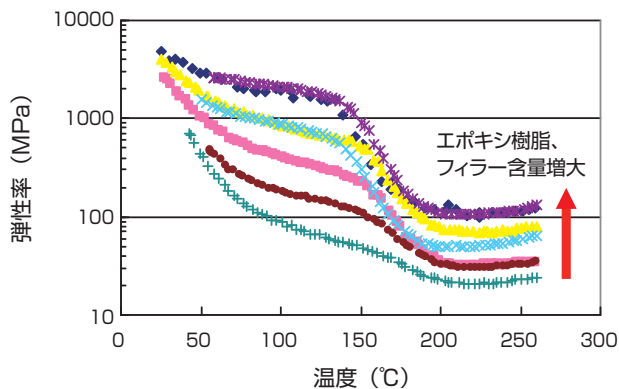
(4) 1点のみの最適値を見いだすことは必要ではなく、むしろ、ばらつきや設計変更への備えのために目標値を満たす解領域の広さが重要になる。

したがって、これらの課題を解決する数理設計手法を構築し、これを実際の開発に役立てることが必要であると考ええる。

著者らは、これまで材料設計に適した、かつ現場で使いやすい設計手法について検討してきた。素材の配合と材料特性との相関を詳しく調べた結果、配合と材料特性の間には準線形関係を有するケースが多いことから、線形計画法をベースに手法を構築することが早道であると考えた。しかし、材料開発に応用した際には目標関数を唯一の直線で表したとしても、解が存在しないケースも考えられる。さらにフィルムの特性のばらつきに対する耐性（ロバスト性）も求められる。つまり、解の制約条件を強くする（最適値のみを議論する）よりも、解の条件を弱くして、目標値を満たす領域の広さや形を議論することが重要である。これらに適した手法として、我々は線形計画法を応用して、複数の素材を配合して、複数の目標値を満たす組合せを算出する材料開発システム：弱条件組合せ線形計画法とそのソフトウェアを開発した<sup>[10]-[12]</sup>。

### 3 弱条件組合せ線形計画法の基礎

ダイボンディングフィルムはエポキシ樹脂、無機粒子等のフィラー、アクリルゴム、触媒等の多数の素材を組み合わせたコンポジット材料である。このため、配合比率を変えることで、図 4a) に示すように、弾性率にだけ注目すれば、かなり幅広く変更することが可能である。半導体メーカーからは、「大体、目標を満足したので、あとは弾性率だけ



a) 種々の配合での弾性率  
図4 各種特性の相関関係

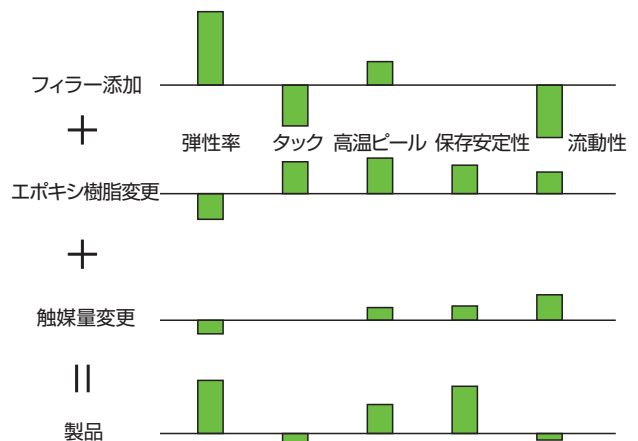
下げてくれ」などと言われることがある。しかし、これは最も難しい注文である。なぜなら、図 4b) に示すように各素材の量を変更すると、弾性率だけでなく、すべての特性値が変化するため、弾性率を下げることによって、今まで目標値を満足していた特性がすべて目標範囲から外れてしまうこともあるからである。

この課題を解決するために、著者らは下式に示すように線形計画法をベースに設計手法を構築した。配合から配合／特性行列により線形写像された値が特性になる。例えば、 $a_{mn}$  はあるエポキシ樹脂の配合量と接着強度の関係を示す。 $a_{mn}$  からなる行列は特性 / 配合行列、 $(c_1 \cdots c_n)$  は配合量ベクトル、 $(p_1 \cdots p_m)$  は特性ベクトル、 $(k_1 \cdots k_n)$  を組合せベクトル、 $\otimes$  は Hadamard 積である。

$$\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \\ \vdots \\ k_n \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}$$

なお、行列の Hadamard 積は下記のように定義される。

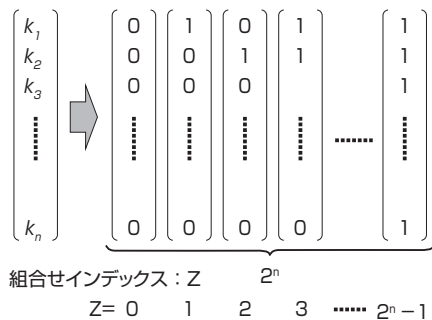
$$A \otimes B = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} \cdot b_{11} & \cdots & a_{1n} \cdot b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} \cdot b_{m1} & \cdots & a_{mn} \cdot b_{mn} \end{pmatrix}$$



b) 各要素の特性への寄与の概念図

図 4b) に示すように各素材の量を変更すると、すべての特性が上下するが、それを相殺したり、足し合わせたりすることで、目標値に合わせ込んでいくことができる。

材料の組合せパラメータ  $k_n$  は材料  $n$  を使用する場合には 1、使用しない場合には 0 とした。素材の組合せベクトルは、組合せインデックス（以下  $Z$  と記す）と 1 対 1 対応する。例えば  $n$  種類の材料から  $0 \sim n$  種類を選んで配合を検討する場合、 $2^n$  通りの組合せが考えられる。組合せの表示を 010101... などのように表すと材料の種類が多い場合に煩雑になることから、この数字の並びを二進数であるとして、十進数の  $Z$  に 1 対 1 対応させた。それぞれについて対応する組成パラメータ  $c_n$  量を変更し、目標とする特性値を満たす範囲があるかどうかを調べることで、目標値を満たす配合範囲を調べることが可能である。



これまでの線形計画法が評価関数の最大あるいは最小の値を探索するのに対して、目標値を満たす解すべてを解集合として扱うことから、“弱条件”と名づけている。解の条件を弱くすることは計算時間の短縮に寄与する。

弱条件組合せ線形計画法は、数学的には、図 5 に示すように、制約を有する組成パラメータ  $c_n$  が作る空間  $C$  が、配合/特性パラメータからなる行列により、特性空間に線形写像され、実現可能な特性の空間  $P$  を作る。空間  $P$  と目標値の空間  $T$  の積集合  $S (=P \cap T)$  が目標値を満たす

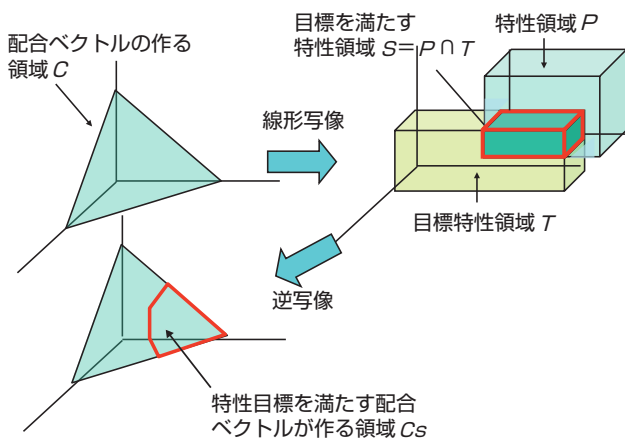


図5 弱条件線形計画法の概略

空間になる。また、 $S$  を満たす組成パラメータ  $c_n$  が作る空間  $C_s$  が定義され、これが目標特性を満足する配合となる。 $S$  や  $C_s$  の領域が広いほど、将来的に要求特性が変化した場合にも対応が可能である点で好ましい。実際にはこの配合の中で、さらにコストや裕度を勘案して配合を決定する。

#### 4 弱条件組合せ線形計画システム

上記の数学的処理は、材料技術者が日常業務として行うには煩雑であり、また、 $2^n$  個の組合せ毎に解空間を求める必要があるため、 $n$  が増加すると計算量が極めて大きくなる。エクセルや手作業の計算では解空間を求めることは極めて困難である。そこで、材料開発の現場においてより実用的に利用可能となる実装した解探索ソフトウェア M-Designer<sup>[10]-[12]</sup> を開発した。M-Designer は、図 6 に示すインターフェイスを持つ弱条件組合せ線形計画ソフトウェアである。M-Designer により、組合せインデックス毎に、目標値を満たす配合（解集合）があるか否かが計算できる。具体的には、あらかじめ実験的あるいは理論的に得られた特性/配合行列の数値、目標特性の範囲、配合数、配合量の上限下限を入力する。その後は、自動的に材料の配合量を適当な間隔で変更し、目標を満足するかを判定し、目標値を満たす配合を出力する。

なお、この配合候補は目標値を満足していれば良く、最適値を求める必要はない。むしろ目標を満たす領域が広いことが重要である。すなわち、領域が広ければ、いろいろな用途に使用できる可能性が増す。また、最適値を求めるアルゴリズムを実装しないシンプルなシステムであるため、後述するように複素物性値を含む非線形計画法、時系列データを含む配合設計等に幅広く使用可能であるというメリットがあることが分かった。

シミュレーションの一例を図 7 に示す。実際の結果の比較については既報<sup>[13]</sup> に示すが、精密さに欠ける点はあるが、特性をおおよそ予測することができる。さらに精度を向上するためには、配合量と特性の関係を非線形連立方程式で表示することが好ましいが、多数の材料の組合

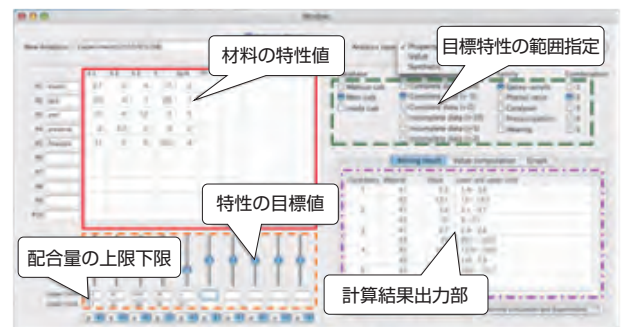


図6 システムのインターフェイス

せを検討する場合、それぞれについて変数  $n$  個の関数を求めるのは極めて多くの実験データを要する。実際には、図8の示す手順で、線形近似で候補材を絞った後、精度が必要な場合に非線形近似を行っている。

このシステムは多数の素材を組み合わせた接着剤の配合検討に使用されてきたが、図9に示すように非線形計画法への拡張<sup>[14]</sup>、材料供給リスク算出<sup>[13]</sup>、データベース化<sup>[15]</sup>等幅広い機能拡張と応用が可能であることが分かってきた。

粘着テープや接着剤等では、材料に対する刺激と応答との間に位相のずれ  $\theta$  がある場合、例えば、正弦波関数  $x=Ae^{-i\omega t}$  で表される歪みに対して、応力が、 $y=Be^{-i(\omega t - \theta)}$  であると、その間に定義される特性値（弾性率）は  $y/x = (B/A) \times e^{i\theta}$  となり、特性値は複素数になり、その制御は極めて重要である。この場合、配合と特性との関係は複素非線形関数になる。このような複素物性についても、複素数をガウス平面のベクトルとして扱うことにより、前述のシステムで処理できる<sup>[10][16]</sup>。

また、一昨年の東日本大震災で浮き彫りになったことの一つに、素材の供給停止リスクがある。高度に効率化、集積化された半導体や自動車産業では、一つの素材や部品の供給が止まっただけで大きな影響が生じる。このシステ

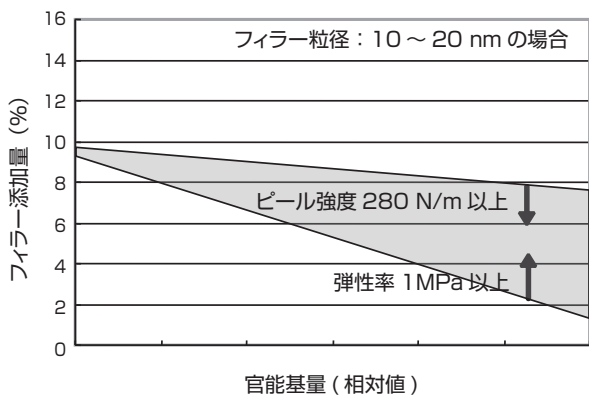


図7 シミュレーションの一例

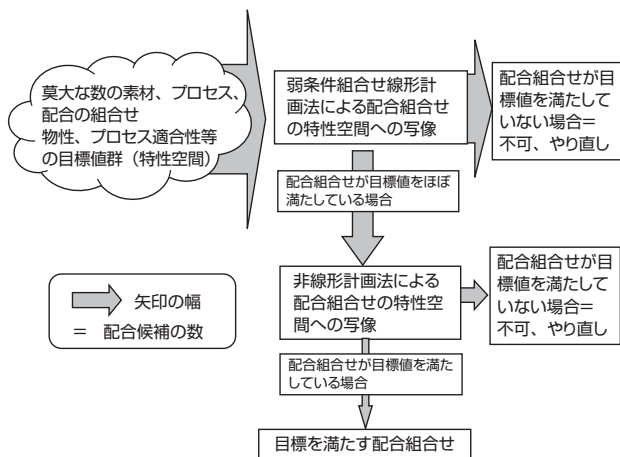


図8 線形、非線型近似の使い分け

ムでは、単に配合候補をいくつか出力するだけでなく、その複数候補が共通の素材を使用しているかを考慮し、供給リスクを算出することができる。素材の供給リスクを正確に把握できない課題はあるが、いずれも 0.01 % 等の一定リスクであると仮定すれば、配合製品の供給ロバスト性を表す指標を算出できる。つまり、設計時にリスク対策を打つことができるのである。

このようなリスクの算出は、これまでの線形計画法では不可能であり、弱条件組合せ線形計画法とその計算システムの構築により初めて可能になったもので、本手法の有用性を示す結果であると考えられる。

また、特性／配合行列等のデータを整理して収納できるデータベースは、過去の失敗データを新規な開発に活かすのに役立っている。この際、単に過去の実験データを保存するだけでは、特性と配合の相関が不明なため、あまり役に立たないが、特性／配合行列等のデータの形で保管し、それを M-Designer に入力、計算することで再利用することができる。例えば、過去には失敗例であったが、構造や目標値が大幅に変更になったことで、若干の修正を加えることで目標値を満足する配合になることもあった。このようなデータベースがあれば、過去の結果を知らずに、もう一度同じ失敗を繰り返すことも防ぐことができる。

## 5 弱条件組合せ線形計画法の応用

本手法は、短期間の開発に特に有効であるため、今後の半導体関連材料の開発に有用であるだけでなく、食品、環境等さまざまな応用展開が可能である。

例えば、この論文では、配合の最適化に焦点を当てたが、設計手法はそれに限定されるものではなく、配合量の代わりに、製造条件、例えば、温度、湿度、速度等、物質以外のものも取り上げることでもできる。

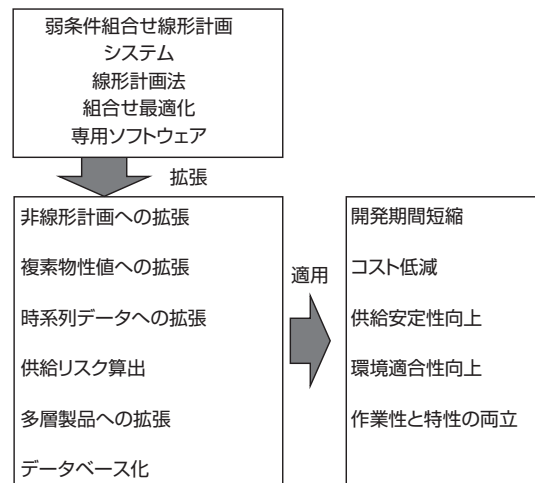


図9 弱条件線形計画法の拡張と適用範囲

また、この論文の最適化手法は、将来的に種々の分野への応用が可能であると考えられる。例えば、調理、香水の調合、酒類の調合、香辛料の調合、漢方薬や合成薬品等の医薬品等、組合せ最適化が重要な分野は枚挙に暇がない。特に食品産業においては、調味料の組合せや素材の組合せによる食味の設計は極めて重要なテーマである。実際には、料理人が旬の素材を活かすため、そのつど味付けを変えるなどの職人の勘、感性を活かして行っているため、これまで数理的設計はほとんど行われていない。味センサー等の開発に伴い、定量的な食味の評価が進んでいることから、今後、この分野での数理設計が大きく進展すると予想する。

## 6 おわりに

この論文では、半導体実装材料等の開発効率化を目指して構築した材料設計手法について述べた。本手法を活用することにより、材料特性を臨機応変に変更して目標値に適合できる能力(アジャスタビリティ)を活かしたオンデマンド製品開発が可能になった。

ブレイクスルーを目的としていないことから、大きな仕事から目をそらした部分最適化に過ぎないとの批判を受けることもある。しかし、ブレイクスルーは別の人が追いかければよいだけである。割り切りがなければ短時間開発はできない。

このように短期間の材料開発の現場は、セレンディピティからは最も縁遠い所と思われたが、意外にも、本手法を用いて素材の組合せから特性を予測しベースラインを明確化した後に実験を行うと、予想からのずれを敏感に検知できることが分かってきた。単なる予測の誤差がほとんどであるが、極稀に予期しない相乗効果や新規な構造による効果によるものもある。つまり、セレンディピティのきっかけを感度良く検知することもできるようになった。

この論文で提案した新たな材料設計手法やシステムは、このようにフィードバックをかけながら、必要な材料をタイムリーに開発するためには、不可欠のツールになると信じている。最終的には、職人芸と融合したオンデマンド材料開発システムを実現することが、究極の課題である。

## 参考文献

- [1] C. Lévi-Strauss: *The Savage Mind*, University of Chicago Press (1966), (Original work, *Pensées Sauvage*, published 1962).
- [2] 荒井裕彦: ロボット技術を用いたスピニング加工(へら絞り), *Synthesiology*, 5 (2), 126-134 (2012).
- [3] 盆子原學: 3次元実装半導体の現状とビジネスの取り組み, *エレクトロニクス実装技術*, 26, 12, 22-26 (2010).
- [4] T. Iwakura, T. Inada, M. Kader and T. Inoue: Structure-properties of acrylic rubber/epoxy adhesive by reaction-

induced phase decomposition, *E-Journal of Soft Materials*, 2, 13-19 (2006).

- [5] 稲田禎一: 反応誘起型相分離を用いたダイボンディングフィルムの設計と実用化に関する研究, 山形大学工学部博士学位論文 (2007).
- [6] W. Leontief: *Input-Output Economics*, Oxford University Press (1966) (新飯田宏訳: 産業連関分析, 岩波書店 (1969).)
- [7] G. Dantzig: *Linear Programming and Extensions*, Princeton University Press (1963).
- [8] 森口繁一: *線形計画法入門*, 日本科学技術連盟 (1957).
- [9] 今野浩, 山下浩: *非線形計画法*, 日科技連出版社 (1978).
- [10] 稲田禎一: プログラムドマテリアル開発のための計算論的最近最適集合解析に関する研究, 山形大学博士論文 (2012).
- [11] 松尾徳朗, 稲田禎一: 弱条件組合せに基づく半導体ダイボンディングフィルム材料設計システム, *情報処理学会第72回全国大会* (2010).
- [12] 稲田禎一, 村形晃規, 松尾徳朗: 弱条件組合せ線形計画に基づく材料設計支援システム, *パーソナルコンピュータ利用技術学会論文誌*, 6 (1), 30-35 (2012).
- [13] 稲田禎一, 松尾徳朗: 材料供給リスク評価アルゴリズム, *パーソナルコンピュータ利用技術学会論文誌*, 7 (1), 1-7 (2013).
- [14] 稲田禎一, 松尾徳朗: 弱条件組合せ線形計画法による熱硬化系接着フィルムの特性予測, *ネットワークポリマー*, 31, 2-10 (2010).
- [15] T. Inada and T. Matsuo: Intelligent material design system based on weak conditioned linear programming, *International Journal of Multimedia and Ubiquitous Engineering*, 7 (4), 45-58 (2012).
- [16] 稲田禎一: 有機ガラス形成物質の緩和時間の一般の性質と複素弾性率の予測式, *ネットワークポリマー*, 34 (4), 207-211 (2013).

## 執筆者略歴

稲田 禎一 (いなだ ていいち)

1990年3月東京工業大学大学院修士課程材料科学専攻修了。同年日立化成(株)入社、現在、同社 筑波総合研究所主管研究員。2007年エレクトロニクス実装学会技術賞受賞。2011年、第9回産学官連携功労者表彰内閣総理大臣賞受賞。2012年、平成23年度高分子学会賞受賞、SERS主催 The 2012 International Conference on Advanced Information Technology and Sensor Application Best Paper Award。博士(工学)、博士(学術)。高分子材料、接着材料および材料配合の数理設計に関心を持つ。高分子学会等会員。この論文では、弱条件組合せ線形計画法の基礎確立と各種応用展開に寄与した。



松尾 徳朗 (まつお とくろう)

2001年3月佐賀大学文化教育学部卒業。2003年3月北陸先端科学技術大学院大学知識科学研究科修了。2006年3月名古屋工業大学大学院工学研究科修了。博士(工学)。同年、山形大学大学院理工学研究科准教授。2010年～2011年カリフォルニア大学アーバイン校客員研究員。2010年よりセントラルミシガン大学ソフトウェア工学情報技術研究所リサーチフェロー。2012年8月より、産業技術大学院大学教授。人工知能、電子商取引、教育工学に関心を持つ。主著として、「Electronic Commerce」(Springer, 2008年)、「E-Activity and Intelligent Web Construction: Effects of Social Design」(IGI20011年)。IEEE、電気学会等会員。この論文では、弱条件組合せ線形計画法の基礎確立とソフトウェアの開発に寄与した。



## 査読者との議論

### 議論1 全体について

コメント（多屋 秀人：産業技術総合研究所広報部）

この論文では、最先端の生産活動の現場で、すでにあるものの組合せにより期限内に目標性能を実現する材料を開発するための材料設計支援ツール構築に向けた取り組みが論じられており、大変興味深い、本シンセシオロジーの趣旨に合致した内容です。

### 議論2 材料開発のスタイル

質問（多屋 秀人）

最先端の半導体用材料の生産現場において超短期間の制約のもとでの材料開発を展開する中で、「単なるプリコラージュではなく、合理的で確実に目標値を達成する材料の開発」を目指し、オンデマンド材料開発手法が開発されています。

オンデマンド材料開発手法で目指すのは、合理的だが、創造性のない単なる足し合わせの材料開発なのか、あるいは、「プリコラージュとエンジニアリングのメリットを併せ持つ手法（図1中のアウフヘーベン）」なのでしょうか。また、両者の関係は、今後どのように展開されるのでしょうか？

回答（稲田 禎一）

この論文での材料開発スタイルは、まずは、合理的だが、創造性のない単なる足し合わせの材料開発です。しかし、これを突き詰めると、意外にも、予期しない相乗効果を見出しやすくなりました。これを説明したのが、図1に記した合理性と創造性の止揚（アウフヘーベン）の図です。

例えば、本手法を用いて素材の組み合わせから特性を予測し、ベースラインを明確化した後に実験を行うと、予想からのずれを敏感に検知できることが分かってきました。つまり、相乗効果がない場合の実験結果を予測することで、小さな相乗効果を検知することができるようになりました。小さな相乗効果を見いだした後、さらにこれを大きくすることに成功し、差別化技術を生み出した例もあります。この論文の材料開発スタイルはともすれば時間に追われた無味乾燥な材料開発に見えますが、予期しない効果を見いだす顕微鏡の役割を果たすのです。

### 議論3 構成について

質問（多屋 秀人）

「3. 弱条件組合せ線形計画法の基礎」について、シミュレーション結果、線形・非線形の使い分け、拡張性等について新たに章を設け、より詳細な説明を記載してはいかがでしょうか？

回答（稲田 禎一）

章を改め、説明を増やしました。内容はこの論文に記載しております。ここでは、ポイントのみ改めて説明します。

#### 1) 複素数への拡張

粘着テープや接着剤等では、しばしば特性値が複素数になります。このような複素物性についても、複素数をガウス平面のベクトルとして扱うことにより、前述のシステムで処理できることを明らかにしました。

#### 2) 供給リスクの算出

材料は目標特性を満たすだけでなく、安定供給できることが重要です。素材の供給停止リスクがある場合に、配合候補が共通の素材

を使用しているかを考慮し、供給リスクを算出することができるようにしました。その結果、目標を満たす材料開発と同時に供給リスクを概算することができるようになりました。このようなリスクの算出は、これまでの線形計画法では不可能であり、弱条件組合せ線形計画法とその計算システムの構築により初めて可能になったものです。

#### 3) データベース化

過去の実験結果を特性／配合行列等のデータの形で保管し、それをM-Designerに入力、計算することで再利用することにより、有効活用ができます。例えば、過去には失敗例であったが、構造や目標値が大幅に変更になったことで、若干の修正を加えることで目標値を満足する配合になるなど、過去の結果を活かして、開発効率を改善することができます。

### 議論4 本開発手法の問題点は？

質問（多屋 秀人）

オンデマンド材料開発手法を生産の実現場に適用する中での評価・評判はどのようなものでしたか？ 導入にあたって配慮した点は何があったのでしょうか？

回答（稲田 禎一）

この手法を社内で説明していたとき、先輩技術者がほそつと言った言葉があります。「ベテランの技術者が頭の中でやっていることを書きくたしたら、きっとこんな感じになるんだろうね」。確かに、ベテランの技術者は素材の良いところ、悪いところを知り尽くして、悪いところが突出しないように、良いところが目立つように設計します。理詰めでの材料開発を徹底的に進めたところが、行き着いたところは、職人芸だったのです。これは、意外なことではなく、職人芸がいかにシステマティックで優れたシステムかを示す事例であると言えます。今後は、理詰めと職人芸を止揚、統合し、さらに一歩先を行くシステムを構築することができるのではないかと考えています。

### 議論5 本手法による開発期間の短縮について

質問（多屋 秀人）

「本手法は、短期間の開発に特に有効である」とのことですが、経験的にどの程度の期間短縮になっているのでしょうか？

回答（稲田 禎一）

実際の開発作業は毎回、目標値や制約条件が異なるため、本手法の使用有り無しでの比較を正確にすることは難しいのですが、経験的には、以下のようなメリットがあります。

- 1) 配合候補は極めて数多くあるのですが、本手法を用いることで、まず、全く可能性のない配合を排除し、可能性の高い候補に絞ることができます。本手法は線形近似のため、実験データとずれがあることは否めませんが、候補材を絞り込むことには十分有効であり、これにより、開発期間は大幅に短縮可能と考えます。
- 2) 改良製品は過去の結果を踏まえて、モディファイをします。例えば、10年前に先人が作った製品を見直して新製品を開発する際、なぜ、これらの材料を配合したのか分からないが、ともかく性能が良いなどがあります。このような場合、なぜ、この機能が出るのか、なぜこの薬品は必要なのか分からないため、わずかな改良もとても手間取ることがあります。このようなとき、解析システムとデータベースがとても役にたち、かつ開発期間短縮ができます。