

論文内容要旨 (和文)

2019 年度入学 大学院博士後期課程

有機材料システム専攻

氏 名 Neo Puay Keong 印

論文題目 A Study on Data-Driven Modeling and Predictive Analysis of Color in Polymers
During Compounding Process
(データ駆動型モデリングと混練工程におけるポリマーの着色予測分析に関する研究)

ポリマーの着色プロセスは、特定の視覚的および美的効果を実現するためにポリマーに色を施すプロセスであり、これによりポリマー材料の高品質化、高付加価値化および高性能化を実現する。この工程では、プラスチック成形加工時に、顔料や着色添加剤などをプラスチックに練り込むことで、プラスチック製品に様々なカラーデザインを施すことができる。従来、プラスチックの色特性は、着色されたペレットを用いて射出成形によって成形品を作製するが、実際の生産ラインとは別の場所または環境でオフラインによる色特性の測定が行われる。その結果、設定、設計した着色プラスチックは加工後の時間変化で色度に変化した場合、成形加工にその情報をフィードバックし、再度顔料や着色添加剤などの添加量を調整する必要が生じ、その開発には時間とコストを要してきた。しかし、コンパウンド行程中のインライン着色測定が可能となれば、その時間を短縮し、コストの低減が実現される。溶融混練工程でのインライン測定では、色度測定器をインラインに直接組み込み、工程のリアルタイムの色度測定が可能になる。しかし、インライン着色測定による信頼性の高い色度測定には、連続着色プロセスであっても温度や押出速度の変動等から限界があり、一貫したカラーモニタリングを保証するために様々な課題がある。そこで、インラインでの着色測定の高精度化とオフラインでの色度測定との関係を解明し、生産における品質管理のために色度の標準化も必要になる。機械学習 (ML) と人工知能 (AI) による解析技術は、オフラインとインライン測定の色度測定プロセスにおける変動や差異を予想することも可能となる。これらの技術は、より正確で効率的な自動色度分析を可能とし、製品の品質と一貫性の向上につながる。AI駆動型システムは、オフラインおよびインライン測定の両方で、過去の色度データとプロセスパラメータから学習し、最適な着色剤の配合や調整を可能にする。そこで本論文では、プラスチックの着色プロセスに着目し、着色混練条件がオフラインおよびインラインの色度測定に及ぼす影響、オフラインとインラインの色度特性の関係、溶融混練時における色度予測のためのデータ駆動型モデリングについて、以下の章で報告する。

第 1 章では、研究の背景、色測定方法の概要、ポリマー着色における ML による溶融混練プロセスの適用など、過去の研究成果をレビューするとともに、本論文の目的を示す。

第 2 章では、無機顔料を含むプラスチックの色特性に対する配合条件の影響を明らかにする。ここでは、メルトフローレート (MFR) や低光線透過率などの要素が色度変化に影響を及ぼし、高MFRおよび低光線透過率のプラスチックでは、低MFR及び高透明度ポリマーと比較して、明度と色強度が同等の顔料含有量で、15~40% 程度向上することが分かった。顔料の含有量がプラスチックの色度特性に影響を与える重要な因子であることが示唆された。さらに、統計分析により、低MFRポリマーの色特性にはスクリュ速度が影響し、高MFRおよび高不透明度ポリマーの色特性には押出温度が影響することが明らかになった。

第 3 章では、プロセス制御におけるインライン色度計測とプラスチック着色における実時間での色度計測の

利点に焦点を当て、射出成形品の着色におけるインライン色度測定とオフライン色度測定の相関関係を明らかにした。ここでは、熔融混練時のプラスチックの滞留時間分布がインライン色度計測によって明らかとなった。また、インラインでの色度と射出成形品（オフライン）の色度では絶対値は異なる値を示すが、その色度変化と相関関係を示すことが明らかとなり、顔料を添加したプラスチックの色特性の予測精度と再現性には非常に重要であることが示唆された。

第4章では、決定木回帰とバギング回帰の適用から予測モデルを開発するため、機械学習アルゴリズムの活用し色特性の予測可能性を確認した。ここでは、二乗平均平方根誤差 (RMSE) を用いて、色特性の予測可能性を議論した。決定木回帰モデルを用いたバギング回帰は、インラインの着色データと材料組成によってオフラインの色データを予測する可能性を示した。このモデルではサンプル数66で、RMSEが10.87を示し、オフラインの色度L*値においてモデルが優れた予測性を示し、その差は3.13%であった。また、オフラインの色度b*値で、その差は15.51%であり、予測能力の向上に有効性を示した。

第5章では、論文の結論を示す。前章までに得られた重要な結果と知見を要約し、さらに実生産時のプラスチック着色における色品質管理の重要性を示した。プラスチックの着色プロセスの安定化を向上させるために、ML（機械学習）とAI（人工知能）を統合することの重要性も説明し、現存の課題と今後の期待も示した。

論文内容要旨 (英文)

2019 年度入学 大学院博士後期課程

有機材料システム専攻

氏 名 Neo Puay Keong

印

論 文 題 目 A Study on Data-Driven Modeling and Predictive Analysis of Color in Polymers During Compounding Process

Polymer coloration is the process of imparting color to polymer materials to achieve desired visual and aesthetic effects creating product brandings. This process incorporates colorants, such as pigments or color masterbatches into the polymer matrix during manufacturing to fabricate a wide range of color designs in polymer products. Color properties of polymer materials are generally carried out off-line measurement at a quality control laboratory, which is a separate location or environment from the actual production line, which can lead to inaccurate color measurements and affect the ability to ensure consistent color quality from the production line. On the other hand, in-line color measurement is integrated color measurement instruments directly into the production line for real-time monitoring and continuous color measurement of the process. However, in-line color measurement may face certain limitations that must be addressed to ensure reliable and consistent color monitoring. Moreover, the accuracy of in-line color monitoring and its relationship with the off-line color measurement are necessary to elucidate and standardization for color acceptance and quality control in production. Therefore, machine learning (ML) and artificial intelligence (AI) have revolutionized to combine both off-line and in-line color measurement processes. These technologies enable more accurate, efficient, and automated color analysis, leading to improved product quality and consistency. The convergence of in-line color measurement with ML algorithms and AI will empower real-time data analysis and predictive modelling. AI-driven systems learn from historical color data and process parameters both off-line and in-line measurements, enabling the prediction of optimal color formulations, adjustments, and potential deviations. Therefore, in this thesis, the effects of compounding conditions on off-line and in-line color measurements, the relationship between the off-line and in-line color properties, and the development of data-driven modelling for predictive color in polymer compounding have been reported in the following Chapters.

Chapter 1 presents the research background, color measurement, and machine learning for polymer coloration, the literature review, and the objectives of the thesis.

Chapter 2 clarifies the influence of compounding conditions on the color properties of polymers incorporated with inorganic pigment. A higher melt flow rate (MFR) polymer and

higher opacity in polymers resulted in increased lightness and color strength, surpassing translucent polymer with lower MFR by 15-40% at equivalent pigment contents. Pigment content emerged as a significant factor influencing the color properties of colored thermoplastics. The statistical analysis revealed the influence of screw speed on the color properties of the low-MFR polymer, whereas die temperature affected the color properties of the high-MFR and high-opacity polymers.

Chapter 3 shows the benefit of in-line color monitoring for process control and real-time color monitoring in polymer coloration. The relationship between in-line color monitoring and the off-line color of the molded products was performed to predict and evaluate the accuracy, and consistency in color properties of polymers incorporated with pigments.

Chapter 4 displays the utilization of machine learning algorithms to develop predictive models from the application of decision tree regression and bagging regressors, and using the root mean square errors (RMSE) to confirm the predictability of color properties. The bagging regressions with a decision tree regression model hold promise in predicting offline color data using inline color data and material compositions as input. The model provided the well predictability on the offline L^* values and b^* values, which were different about 3.13% and 15.51%. The model achieved an RMSE of 10.87 at a sample size of 66.

Chapter 5 is the conclusion of the Thesis. The important results of the Thesis are summarized and demonstrated the importance of integrating machine learning (ML) and artificial intelligence (AI) for the accuracy of polymer coloring process. The challenge and future expectation are presented.

学位論文の審査及び最終試験の結果の要旨

2024 年 8 月 7 日

有機材料システム研究科長 殿

課程博士論文審査委員会

主査 伊藤 浩志
副査 前山 勝也
副査 松葉 豪
副査 Sukumaran Sathish Kumar
副査



学位論文の審査及び最終試験の結果を下記のとおり報告します。

記

論文申請者	有機材料システム専攻 氏名 Neo Puay Keong		
論文題目	A Study on Data-Driven Modeling and Predictive Analysis of Color in Polymers During Compounding Process (データ駆動型モデリングと混練工程におけるポリマーの着色予測分析に関する研究)		
学位論文審査結果	合格	論文審査年月日	2024 年 7 月 22 日～ 2024 年 7 月 30 日
論文公聴会	2024 年 7 月 30 日	場 所	工学部 GMAP 4-406 教室
最終試験結果	合格	最終試験年月日	2024 年 7 月 30 日

学位論文の審査結果の要旨 (1,000 字程度)

本論文では、着色プラスチックの生産過程における着色の挙動を把握し、安定した生産を図るため、着色混練条件がオフラインおよびインラインの色度測定に及ぼす影響、オフラインとインラインの色度特性の関係、熔融混練時における色度予測のためのデータ駆動型モデリングについて研究を行っており、ここでは全 5 章で構成されている。

第 1 章では、序論として本研究の背景と目的および本論文の構成が述べられている。

第 2 章では、無機顔料を含むプラスチックの色特性に対する配合条件の影響について述べられている。さらに、統計分析によって、プラスチックの粘度と混練条件（スクリュウ速度や押出温度）の影響について明らかにしている。

第 3 章では、プロセス制御におけるインライン色度計測とプラスチック着色における実時間で色度計測の利点に焦点を当て、射出成形品の着色におけるインライン色度測定とオフライン色度測定の相関関係を明らかにしている。

第 4 章では決定木回帰とバギング回帰の適用から予測モデルを開発するため、機械学習アルゴリズムの活用した着色予測について述べられている。ここでは、決定木回帰モデルを用いたバギング回帰によって、インラインの着色データと材料組成によって成形品の着色を予測する可能性を示している。

第 5 章では、論文の結論を示す。前章までに得られた重要な結果と知見を要約し、さらに実生産時のプラスチック着色における色品質管理の重要性を示している。

本学位論文は、プラスチックの着色特性に対する添加剤やプラスチックの流動性の影響を明らかにするとともに、プロセス中の色度測定の有効性や着色挙動の予測可能性について系統的に調査し、さらに混練プロセスおよび材料特性の両面から着色機構についてまとめており、新規性・独創性が伺える。研究背景および目的が的確に述べられ、論文構成も適切で体裁も整っており、記述が論理的で設定した研究テーマに沿った明確な結論が述べられている。

研究テーマの新規性・独自性については、査読付きの英文学術誌に 2 報が掲載済みとなっており、本研究に対して客観的な評価が得られている。また、これまで国際学会で 1 件、国内学会で 2 件の研究発表を行なっている。本学位論文は学位論文審査基準（大学院有機材料システム研究科博士後期課程）を満たしており、合格と判定した。

本論文は、研究倫理又は利益相反等に係る学内規則に基づく手続きは必要ありません。

最終試験の結果の要旨

公聴会終了後に主査及び副査 3 名により最終試験を実施した。最終試験は、本学の規定に従い、本論文および関連分野に関して 30 分の口頭試問により実施した。その結果、学位論文の内容ならびに関連分野に関する理解度は十分であり、博士の学位を授与するのに十分な知識と能力を有していると判断し、合格と判定した。