

AIによる成分分析技術の高度化に関する試験・研究開発

－ 迅速な成分分析結果を得るために －

Research and development on the advancement of component analysis technology using AI

－ To obtain rapid component analysis results －

横濱 和彦

県内企業から依頼試験で持ち込まれる製造品である試料の成分分析を行う際に問題となるのが、製造の過程で混入される添加物である。こうした混合物によって計測結果の波形などが影響を受けるため、誤認識した検索結果となる事例がある。そのため、現状では分析担当者がライブラリと計測結果の比較を行い、混合物の有無や、試料の主要物質が何か確認を行っている。

また、近年はSDGsの考えが広がり、県内企業が試作した再生品への計測依頼や技術相談の件数が増えている。

本研究では、AI等の解析技術を工総研の所有する計測機器群の計測結果に用いることで、迅速に主要物質と添加物を識別して検出する技術や、添加物の違いを識別し分類する技術の開発を目的としている。

令和6年度は、有機化合物に対する工総研の所有機器による計測で得られた波形データから、AIを用いることで化合物や付着物の特定が可能な分析方法の構築を行った。

①樹脂試料

(ターゲットとなる可能性のあるもの)

- ・PET
- ・PE
- ・PS
- ・PP

事例：
食品中の異物(調味料・食用油付着)
部品製造中に発生した異物
(機械油付着)

②混合または付着物の候補

(これまで事例のあったもの、可能性のあるもの)

- ・植物油(植物由来)
- ・ミシン油
- ・醤油

①・②単独または混合で計測



フーリエ変換赤外分光光度計

波形データの CSV ファイル

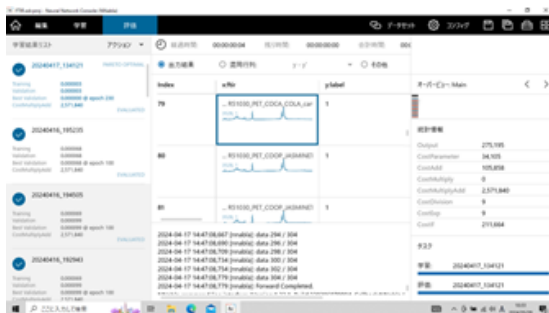
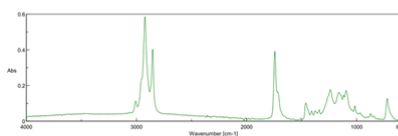


図 SONY Neural Network Console(NNC)による学習・評価の実施

る付着物側の波形特徴が強い状態の波形データが得られた。逆に締め付けトルクを強くすると試料台と樹脂側の間に存在する付着物が締め付けの圧力で除外されて、樹脂側の波形特徴が強い状態の波形データが得られた(図2)。締め付けトルクが強くなり弱くもない計測に良好な条件となった際には、樹脂側・付着側双方の特徴を持った波形を検出することができた(図3)。

・固定強度良好の時：
PET+植物油の波形検出



試料固定用ロッド

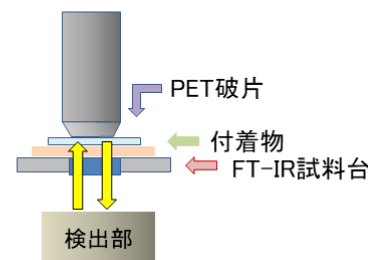


図3. 固定が良好な際の試料の状況と計測結果波形

この計測方法によって得られた波形データを、樹脂側と付着物側の単独の他に。各試料の組み合わせ毎に100件以上収集し、波形データをCSVファイル化したうえでNNCによる機械学習を実施した。

3. 結果と考察

3.1 波形データからの評価方法

NNCによる機械学習後に、試料毎にピックアップした各10件のサンプルに対して分析評価を行った(図4)。その結果、計測対象の試料が単体・混合のどちらの状態でも、識別することができることを確認できた。また、FT-IRによる分析を行う場合、計測の結果得られた波形はFT-IR内のライブラリに登録されている波形データのどれに最も近い波形となっているかを検索し、解析結果を出力する。しかし、基本的に登録されている波形データは純物質での計測結果が多く、複数の化合物が混合した状態の試料に対して的確に分析することは困難である。通常は検索結果で上位に選定されている波形データと比較しながら、吸光する波長が一致している波形を持つ物質を選定することで、どのような化合物が特定していく。こうした確認作業に、これまでの評価方法では1時間程度が必要だった時間を短縮できた。

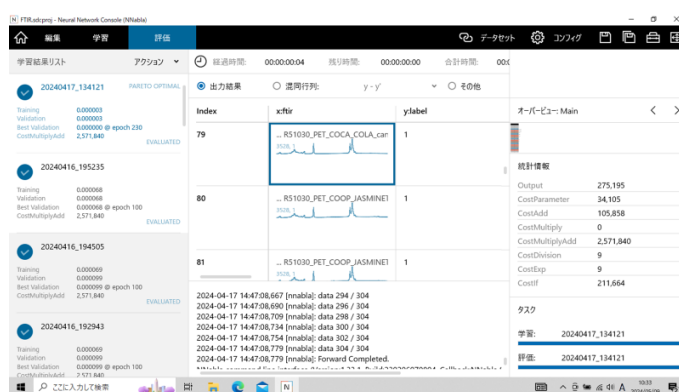


図4. NNC(Sony Neural Network Console)による評価

3.2 評価結果

今回のNNCによる分析方法を実施した結果、試料の化学構造の特定に検出を10分程度に短縮することができることを確認できた。これは、これまでは強く検出されている化合物の特定を行った後、検索結果の中から特定された化合物以外に、化合物の特徴の波形が検出されていないか確認する作業が必要となるためである。NNCを用いた分析結果では、これらの2つの化合物を特定する作業を一度の評価結果で確認することができるため、分析時間を大きく短縮することができた実施結果となった。

また、混合物となっている試料に対しても識別できていることを確認できた。これらの波形データから、単独の化合物の試料および2種の化合物が混合している試料の識別・評価ができる機能が構築されていることを表1の結果で確認することができた。

表 1.NNC による評価結果

計測対象	PET	PET+ミシン油	PET+植物油	PET+醤油	ミシン油	植物油	醤油	PET+植物油+醤油
PET	1	0	0	0	0	0	0	0
PET+ミシン油	0	1	0	0	0	0	0	0
PET+植物油	0	0	1	0	0	0	0	0
PET+醤油	0	0	0	1	0	0	0	0
ミシン油	0	0	0	0	1	0	0	0
植物油	0	0	0	0	0	1	0	0
醤油	0	0	0	0	0	0	1	0
PET+植物油+醤油	0	0	0	0	0	0	0	1

計測対象	PE	PP	PS	PE +ミシン油	PE +植物油	PE +醤油	PP +ミシン油	PP +植物油	PP +醤油
PE	1	0	0	0	0	0	0	0	0
PP	0	1	0	0	0	0	0	0	0
PS	0	0	1	0	0	0	0	0	0
PE+ミシン油	0	0	0	1	0	0	0	0	0
PE+植物油	0	0	0	0	1	0	0	0	0
PE+醤油	0	0	0	0	0	1	0	0	0
PP+ミシン油	0	0	0	0	0	0	1	0	0
PP+植物油	0	0	0	0	0	0	0	1	0
PP+醤油	0	0	0	0	0	0	0	0	1

4. 考察

NNC を用いた分析方法を用いることで、不具合品である試料の分析結果を、従来の手順よりも短時間で企業側に提供することが可能になる。特に複数の素材が混合している試料の場合に、分析結果を得られるまでの所要時間が大きく削減できることで、県内企業側の損害の軽減が期待できる。その一方で、機械学習を行った際の波形データに含まれていない試料が含まれる混合物の場合、評価時に識別の精度が低下する可能性が高い。また、実際に基材と付着物のような形で2種の化合物の混合の試料を計測することも考えられるため、複数での化合物の波形データを機械学習させて、計測対応ができる素材の幅を広げていく必要も考えられる。今後は SDGs による再生樹脂への評価や EU による RoHS 指令のような規制物質が含有した試料への対応もできるように、各種試料の組合せの波形データの種類の幅を広げ、機械学習の件数を積み上げていくことで、評価での精度を向上させること、FT-IR で検出が困難な試料に対して他の計測機器を用いて補完を行う分析フローを構築していくことが、今後の課題となる。

5. まとめ

樹脂(PET、PE、PS、PP)と付着物候補(植物油、ミシン油、醤油)について単体および混合の状態で FT-IR による計測結果の波形データ収集を実施後、AI である NNC を用いた機械学習を行い、それぞれの試料に対して識別ができるか評価を行った。機械学習後に各種ごとのデータに評価を行った結果、試料毎の識別ができることを確認できた。また、識別に必要な時間を、従来の方法から大幅に短縮することが可能になることを確認できた。

本評価方法を用いることで、分析担当者の違いによる評価結果や分析時間のばらつきを極力軽減した形で、県内企業に迅速に分析結果の提供ができると考えられる。