# <修士論文>

# カラーフィルター用顔料分散液の スペクトル最適化

滋賀大学大学院 データサイエンス研究科 データサイエンス専攻

修了年度:2021年度 学籍番号:6020103 氏 名:大泊 研 指導教員:岩山 幸治 提出年月日:2022年1月11日

# 目次

第1章序章	3
1.1.1 本研究の狙い	3
1.2.1 業界動向	4
1.2.2 カラーフィルターに関わる製造メーカー	4
1.3.1 液晶ディスプレイ LCD (Liquid Crystal Display)	7
1.3.2 白色有機 EL W-OLED (White Organic Light Emitting Diode)	8
1.3.3 量子ドットパネル(QLED、QD-OLED)	8
1.3.4 バックライトの光強度分布の変遷	10
1.4.1 カラーフィルター用顔料分散液	11
1.4.2 カラーレジスト	12
1.4.3 パネルメーカーにおけるカラーフィルター製造工程と品質要求項目	12
1.4.4 試料の透過率測定	14
	1-
第2章 透過スペクトルと関数アーダ化処埋	15
2.1.1 カラーフィルターの透過スペクトル測定と評価方法	15
2.1.2 XYZ 表色系 (CIE1931 表色系)	16
2.2.1 関数データ解析	19
2.2.2 補間	19
2.2.3 基底関数展開	20
2.2.4 B-スプライン	21
第3章最適化問題	25
3.1.1 最適化問題の分類	25
3.1.2 線形計画問題	26
3.1.3 Python パッケージによる数理最適化問題のモデリング	26
第4章 最適化問題としての定式化とその結果	28
4.1.1 離散データの連続データへの補間	
4.1.2 B-スプラインによる基底関数展開	28
4.1.3 最適化問題	29
4.1.4 顧客指定色度における輝度最大化の検証実験	
第5章 結論と今後の展望	39
引用 · 参考文献	41

# 第1章 序章

# 1.1 研究背景

#### 1.1.1 本研究の狙い

フラットパネルディスプレイ(略称:パネル)は、携帯電話、デジタルカメラ、携帯情報 機器などの小型サイズのものから、100 インチを越す大型サイズの液晶テレビまで幅広く 使用されている。毎年 iPhone の新製品が発表されるように、パネルが表示する映像に対す る要求品質は依然として高く、パネル構成部材を製造する企業間の技術開発競争が盛んで ある。そのためパネル構成部材を上市するには、市場と顧客の要求に迅速に対応して研究 開発をする必要がある。パネルには発色に関わる主要な部材として、バックライトとカラ ーフィルターがある。パネルでは発色に関わる主要な部材として、バックライトとカラ ーフィルターがある。パネル背面側のバックライトの光が、パネル内部の部材を通過し、 パネル前面側のカラーフィルターを通過することにより、私たちの目に多彩色な映像が映 る仕組みとなっている。カラーフィルターを着色するカラーフィルター用顔料分散液は、 パネルの発色を決める重要な要素の一つである。カラーフィルター用顔料分散液に求めら れる主な物性値は、色度と輝度である。色度と輝度は日本工業規格(JIS Z 8781-3:2016) [1] に定められた計算式に則り、バックライトの光強度分布とカラーフィルターの透過スペク トルから計算される。そのため色度と輝度を改良するためには、バックライトの光強度分 布に合わせて、最適な透過スペクトルになるようにカラーフィルター用顔料分散液の材料 設計をする必要がある。

また一方でパネルには、性能の向上を要求されると同時に省電力化も要求されてきた。 その背景として、液晶テレビや液晶モニターは日常的に長時間使用する製品であり、一般 家庭内における電力消費量が大きいことがある。液晶テレビの電力消費量が大きくなる構 造的な要因として、バックライトの光が液晶セル部材とカラーフィルターを通過すること で光量が下がるため、バックライトは強い光量を出す必要があり、消費電力量が大きくな ることがある。そのような背景からパネルの普及と同時に、高品質化(筐体の薄型化・映 像の高輝度と広色域化など)と省電力化が求められてきた。その結果として、メーカーの 技術革新により 2010 年から 9 年間でテレビ消費電力量は 30%以上の省電力化を達成して きた [2]。その技術革新の大きな節目となったものとして、新しいバックライトの技術革 新がある。液晶ディスプレイが登場した 2000 年頃に使用されていたバックライトは冷陰極 管や白色 LED であったが、2013 年頃に白色 LED から白色有機 LED (W-OLED) へと変遷して きた。そして近年では量子ドット(QD)技術がパネルに応用開発されており、量子ドットデ ィスプレイ (QD-OLED)が 2021 年第4半期に上市予定とされている。

本研究では、技術革新により切り替わるバックライトに対して、顧客が指定する色度に おける輝度の目標値を超えるカラーフィルター用顔料分散液のスペクトルを数理最適化で 算出し、カラーフィルター用顔料分散液の材料設計者に早期に開発指針を出すことを目的 とする。その結果として、市場が求める要求に応じた製品を迅速に開発し、社会に彩色豊 かな映像が提供できると期待される。

3

# 1.2 フラットパネルディスプレイ

この節ではカラーフィルター用分散液を部材とするパネルについての、業界動向・製造 メーカーについて述べた後、カラーフィルター用分散液を製造するインキメーカーの状況 について述べる。

# 1.2.1 業界動向

パネルは、テレビやモニターなど大型用途向けや、携帯電話やタブレット端末など中小 型用途向けというように、様々な用途向けに製造されている。世界中で生産されるパネル の用途別のシェア率について、2016 年から 2019 年までの生産実績値と、2020 年から 2025 年までの推測値 [3]を図 1 に示す。液晶テレビ(LCD)は今後も約 70%の圧倒的なシェアを維 持すると推測されている。また有機 EL テレビ(OLED)は最も急速に成長しており、年平均 成長率は 32%となり、そのシェアは 2020 年の 2%から 2025 年には 7%になると推測されて いる。カラーフィルターを使用するパネルには、LCD と W-OLED と QLED および QD-OLED があり、全て今後もシェアを維持もしくは成長する用途のパネルとして考えられて おり、特に大型用途向けのテレビ需要は今後も高い水準を維持すると考えられている。そ のためカラーフィルターに関する技術開発は今後も続くと考えられる。



図1用途別生産能力(文献[3]より引用)

# 1.2.2 カラーフィルターに関わる製造メーカー

パネル業界におけるカラーフィルターの生産には大きく分けて 4 つのメーカーが関わっ ている。パネル製造工程の川上から順にメーカーを挙げると、化学原材料メーカー、カラ ーフィルター用顔料分散液を製造するインキメーカー、紫外線で硬化する透明液体を製造 するレジストメーカー、カラーレジスト(カラーフィルター用顔料分散液とレジストの混合 物)を使用するパネルメーカーの 4 社がある。製造工程順に化学原材料からパネルへと製 品が流れるが、製品の要求品質は逆の工程を辿る(図 2)。



要求品質の流れ

図2 パネル製造に関わるメーカー

研究背景でも述べたように、市場におけるパネル映像に対する要求品質が依然として高 い。そのため工場ラインで生産中のパネルを新しく切り替えるタイミングで製品品質のス ペックが改定されることが多い。その切り替えのタイミングにおいて、レジストメーカー がパネルメーカーに新しいカラーレジストを納入できるよう、高品質な製品を研究開発す ることになる。色性能はカラーフィルター用顔料分散液に依存するため、レジストメーカ ーはインキメーカーに改良を求めて研究開発を促す。そして、インキメーカーは化学原材 料メーカーに改良を求め、要求品質が製造工程の川上へと遡る。その結果、パネル関連部 材を製造する企業は、スペックが改定される度に、競合他社との開発競争が盛んになり、 納入されるパネルの品質が向上することになる。

色に関する物性値は、カラーフィルター用顔料分散液を製造するインキメーカーの技術 に依存するところが大きく、インキメーカー間においても技術開発競争が非常に活発であ る。キメラ総研が出版した「カラーフィルター用顔料分散液の市場規模推移・予測」[4]に 関する資料を図3に示す。この図において、2018-2019年度は実測値で2020年度以降は予 測値である。今後もパネルの生産量は増加し、それに伴いカラーフィルター用顔料分散液 の市場規模も増加し続けると予測している。また、カラーフィルター用顔料分散液のメー カーシェア(2019年実績)を図4に示す。カラーフィルター用顔料分散液のメーカーシェア は、韓国メーカーのSKC社を除き、日本の化学メーカーが多くを占めている。高品質より 製造コスト減の要求が勝らない間は、高い分散技術力をもつ日本の化学メーカーが海外メ ーカーより優勢となっており、しばらくは日本企業間の技術開発競争が続くと考えられる。



図 3 2019 年時点におけるカラーフィルター用顔料分散液の市場規模推移・予測(文献[4]より 引用)



図4カラーフィルター用顔料分散液のメーカーシェアの2019年実績(文献[4]より引用)

# 1.3 パネルの構造

パネルの構造は技術革新により大きく変遷し続けており、映像表示に必要なバックライトの変更に伴う変化が大きい。カラーフィルターを部材として使用するパネルを、世に登場した順に挙げると、液晶テレビ(LCD)、白色有機 EL テレビ(W-OLED)、量子ドットテレビ(QLED および QD-OLED)の3種類のパネルがある。2021年10月時点での市場では LCDとW-OLEDの2種類のパネルがテレビの主流商品であるが、LCD に量子ドットシートを貼り付けたパネルを量子ドットTVとして「QLED」の名称でLG Display 社が販売開始したため、電気量販店のテレビ展示では図5のように次世代テレビの量子ドットテレビとして広告が打たれている(QD-OLED はまだ 2021年10月時点で市場に出ていない)。この節において、カラーフィルターを使用する3種類のパネルについて部材構成を模式図とともに説明し、模式図からバックライトとカラーフィルターのパネル内部の構成を把握し、各パネルの特徴を把握する。



図 5 ヨドバシカメラ マルチメディア梅田の展示 (2021年10月大阪 梅田にて)

# 1.3.1 液晶ディスプレイ LCD (Liquid Crystal Display)

LCD は画像データを電気信号に変換し、液晶層の小さな一つ一つの画素に、トランジス タ(スイッチ素子)によって光透過状態と光遮断状態を作り出す。膨大な画素群を集約しカ ラー化した画像が LCD の画面である [5]。LCD のパネル構成図を図 6 に示す。対向電極側 基板モジュールと TFT 側基板モジュールに加えて、その間に液晶を封入した液晶シャッタ ー部で構成される。光源のバックライトは液晶シャッター部の背面に配置し、カラーフィ ルターは液晶シャッターの前に配置している。透明電極間(画素電極と透明導電膜)に電 圧をかけると液晶が配列方向を変えることができ、特定方向の光しか通さない偏光板の向 きに対して平行・垂直に調整し、光の透過・遮断を切り替える構造となっている。



図6液晶パネル(透過型 TFT 液晶の場合)(文献[5]より引用)

# 1.3.2 白色有機 EL W-OLED (White Organic Light Emitting Diode)

W-OLED は電圧を印加することで自発光する白色有機 EL 材料をバックライトにしてい る。バックライトから放出された白色光を LCD と同様にカラーフィルタを通過させること で RGB の 3 色の映像を映し出す構造である(図 7)。LCD に対するメリットとして、光の透 過・遮断の役割を担っていた液晶シャッター部が不必要となることで筐体が薄くなり、偏 光板による光量の減少も無くなり、消費電力の効率が良くなる。また、LCD ではバックラ イトがオンのまま液晶スイッチで光を遮断することで黒色を表現していたが、W-OLED で はバックライトをオフにしてそもそも光らないため、黒色をより黒く表現することが可能 となった。製造面においても発光層(白)の塗布工程が1度で済むため、生産効率が高く、大 型サイズ向けのテレビ等に向いている。一方、デメリットとして、W-OLED は赤と緑の波 長領域の光強度分布が青より弱いため、全体として暗く見える特徴がある。



図 7 W-OLED の構造(文献[5]より改変して引用)

# 1.3.3 量子ドットパネル (QLED、QD-OLED)

近年、テレビ製品はフル HD から 4K へと高精細化し、広色域化が進んで光の取り出し効率が不利になる一方で、より高輝度が求められる「HDR」規格が登場し、消費電力が増加傾向にある。さらに市場のトレンドは 8K や超大画面化へと向かい、より高輝度化を実現する技術が望まれていたところ、量子ドット(Quantum Dot)を利用したバックライトの技術が開発された。QD とは 10nm 程度以下の半導体結晶である。QD は組成にもよるが概ね一辺 10nm 以下のサイズであり、結晶サイズが電子の広がりよりも小さい場合、不確定性原理から電子の運動エネルギーは増大する。QD の発光素子としての基本的な性質として次の3点が挙げられる。まず1つ目として、QDのサイズによって電子の励起エネルギーが異なるので、同一の組成でもサイズによって発光波長を変換できることがあげられる(図 8)。 2 つ目として、エネルギー準位が離散化しているため、単色性の高い発光が得られることがある。そして 3 つ目として、電子と正孔が空間的に閉じ込められているため、発光再結合が起こりやすく発光効率が高いことがあげられる [6]。



図8量子ドットによる波長変換

QDの性質を利用した量子テレビとして「QLED」と「QD-OLED」の2つの構造が技術的 に開発されている。まずは量子テレビとして先に市場に登場した「QLED」の構造から述 べる。QLED と LED の大きな違いは LED 液晶パネルのバックライトを、従来の白色 LED から青色 LED に変更して QD シートを貼り付けていることである(図 9)。光強度の強い青色 LED の発光を QD シートで波長変換することで、光強度が強いバックライトとなり、より 明るいパネルを製造することができる。Samsung EL 社が開発した「QLED」は QD シート の低価格化が進み、現在も順調に出荷量を増やしている。



# 図 9 QLED の構造。バックライトの青色 LED に QD シートを貼り付けている (文献[5]より一部 改変し引用)。

Samsung Display 社が開発する QD-OLED パネルは、バックライトを青色の有機 EL(B-OLED)にしている。赤と緑の発色については QD で発光波長を変換し、カラーフィルターを透過させることで色度を調整し、光強度の強い赤と緑を出力している(図 10)。カラーフィルターを併用する理由は、量子ドットが偏光特性を保つため、円偏光版が使用できないことを要因とする外光反射への対策と、変換しきれなかった OLED の青色をカットする対策である。QD-OLED パネルの開発は、低コスト化やプロセスの改善などのために難航している [4]。



図 10 QD-OLED の構造(文献[4]より引用)

Samsung Display 社は QD-OLED の量産時期を 2021 年としている。開発が難航している が、LG Display 社の W-OLED が量産から 100 万枚以上の生産に至るまで 2~3 年を要したこ とを考慮すると、QD-OLED の立ち上がりも同程度のペースで進むと予測されている(図 11)。 インキメーカーにおいては、レジストメーカーから QD-OLED 用のカラーフィルター顔料 分散液の開発依頼が多いので、パネルメーカーにおいては現在も開発が進んでいると考え られる。



図 11QD-OLED の市場規模推移・予測(文献[4]より引用)

# 1.3.4 バックライトの光強度分布の変遷

LED、量子ドットパネル(QLED)について、カラーフィルターを透過した後の光強度 分布を図 12 に示す。LCD は光強度分布が全体的に強く、RGB 各色に対応する波長の光強 度分布の半値幅が広く、裾が広がっている。図 12 に W-OLED の光強度分布は示されてい ないが、一般的に W-OLED は G と B の光強度が LED より弱く全体的に暗いと評価されて いる。量子ドットパネルについては LED や W-OLED の欠点を補うようにして、各色のピ ーク強度に大きな差がなく半値幅も狭いため、より広配色かつ高輝度な映像表示が可能と なっている。



図 12 LCD と QLED の光強度分布(文献[7]より引用)

しかし、バックライトの強度分布が変わると同じカラーフィルターでは色度が変化する ので、指定色度の輝度を最大化するためには、バックライトの光強度分布に合わせてカラ ーフィルター用顔料分散液もスペクトルの形を調整して開発する必要がある。

# 1.4 カラーフィルター

カラーフィルターの材料と製造工程および性能評価について述べる。

# 1.4.1 カラーフィルター用顔料分散液

顔料分散液は、着色顔料、顔料分散助剤、分散剤、樹脂、有機溶剤から主として構成さ れる着色溶液である。各材料の配合割合とその役割を表1に示す。顔料分散液の開発にお いては、カラーフィルター塗膜の着色力を高くするため、膜厚に対する光吸光度が高くな るように、着色顔料以外の固形材料を少なく配合設計する傾向にある。しかし、分散剤等 は顔料分散液の流動性を保つために必要不可欠であるため、その配合を調整することが求 められる。インキメーカーはレジストメーカーの要求性能を満たすべく、化学原材料メー カーや自社開発の原材料を用いて、指定された色度座標において高い輝度をもつ顔料分散 液を開発することになる。顔料分散液の材料の中で、最も色度や輝度に関わるものは着色 顔料である。その他の無着色の固形材料は、パネルメーカーでの焼成工程において着色す るなど色度がわずかに変化する場合がある。

材料名	割合(参考値)	役割	
顏料	約15%	色表示	
顏料誘導体	約1%	色表示、粘度安定性	
分散剤	約4.5%	粘度安定性	
樹脂	約4.5%	粘度安定性、現像性、耐熱性	
添加剤	約1%	塗工適性	
溶剤	rest	塗工適性	
合計	100%	-	

表1カラーフィルター用顔料分散液の配合割合の例とその役割

# 1.4.2 カラーレジスト

カラーレジストとは、レジストメーカーが製造するレジスト(無色透明)と顔料分散液(有 色)の混合物である。レジストは主に光開始材、モノマー、樹脂、および有機溶剤などで構 成される(表 2)。レジストに紫外線を照射すると、光開始剤が開裂してモノマーや樹脂と 重合反応を生じて硬化する。レジストメーカーは、パネルの製造工程に必要な要求品質を 満たすべく材料の配合設計を行うが、混合する顔料分散液に含有する材料が最終製品とな るカラーレジストの品質に影響するため、インキメーカーとの共同開発が非常に重要な要 素になる。レジストに含有する透明材料も、パネルメーカーでの焼成工程で着色すること があるため、すべての原材料も考慮して総合的な材料選定が重要となる。

材料名	割合(参考値)	考値) 役割	
顏料分散液	約60%		
光開始剤	約0.5%	紫外光照射で光硬化を誘発	
多官能モノマー	約1.5%	光硬化を進行	
樹脂	約8%	現像性、耐熱性、紫外光感度	
添加剤	約1%	塗工適性	
溶剤 rest		塗工適性	
合計	100%	-	

表2カラーレジスト液の配合割合の例とその役割

# 1.4.3 パネルメーカーにおけるカラーフィルター製造工程と品質要求項目

カラーフィルターの製造工程(感光アクリル法)について簡単に述べる。まずカラーレジ ストをガラス基板に一定の膜厚で塗布して乾燥させる。次に、フォトマスクでパターン化 された紫外線を照射することで、塗膜を硬化させる。未露光部の塗膜をアルカリ現像液と 精製水で溶解させて、一色一面に塗布した塗膜をパターン化する。その後、230℃の高温 環境下で焼成してパターン化した塗膜を焼き固める。この操作を黒(RGBの境界線部)、赤 (R)、緑(G)、青(B)の順に4回繰り返すことで、ガラス基板上に3色が配列された基板が完 成する(図13)。



この製造工程において、設定した要求性能を満たす要求項目(表 3)がある。

LCD要求項目 CF技術 高性能化 高透明化 高色再現性化 新構成CF技術 高コントラスト比化 高精細化 材料技術 (RGB画素材料など) 高視野角化 高速応答化 製造技術 高信頼性化 (フォトリソグラフィーなど) 機能付加技術 コスト削減 基盤大型化 (フォトスペーサーなど) 薬液使用料削減 製造装置技術 タクトタイム短縮 (塗布装置、露光装置など) 新規製造技術 工程削減 (インクジェット法など) 原料コスト減 省電力化

表 3 LCD 要求項目と CF 技術(文献[8]より引用)

パネルメーカーが提示するスペックを満たすために、各メーカーは原材料の配合を調整 し、社内にて実験評価を行い、各性能を確認する。高色再現化の評価手法は、人間の目に 対する色感覚の評価システムが基本となる。この色感覚の評価には、一つの色刺激に対し て一義的な心理物理量(色刺激)を対応させて数値化することが重要となる。この数値化 をシステム化したのが XYZ 表色系である [8]。カラーフィルターの色度と輝度の評価をす るためには、可視光領域の波長 380nm から 780nm までの光透過率を測定し、XYZ 表色系で 評価を行うことが一般的である。

#### 1.4.4 試料の透過率測定

色評価を行うための測定試料の作成、および測定条件を説明する。まずカラーフィルタ ー用顔料分散液(表 1)とレジスト液を混合・攪拌して、カラーレジスト(表 2)を作製する。 その際、カラーレジスト中の固形物に対する顔料の割合(Pigment Weight Content)が 35%(参 考値)になるように配合量の調整をすることで、塗膜中の顔料重量が一定になるようにする。 塗膜中の顔料重量を一定にすることにより、他顔料と同じ色度を表現するために必要な塗 膜の膜厚に相当する着色力などを評価することができる。次にスピンコーターを用いて、 所定の回転数と時間で回したガラス基板に対して、カラーレジストを約 2cc 滴下し、ガラ ス基板上に均一に塗布する。ガラス基板を3分間100℃設定のホットプレートの上に置き、 カラーレジスト中の溶剤を揮発させて塗膜にする。高圧水銀灯で塗膜全体に一定エネルギ ー量の紫外線を照射して塗膜を光硬化させ、オーブンを用いて 30 分間 230℃の環境下に静 置させて焼成する。仕上がったガラス基板上の塗膜の膜厚を精密に測定し、紫外可視分光 光度計で透過スペクトルを測定する。こうして得られた透過スペクトルに対し、日本工業 規格(JIS Z 8781-3:2016)の計算式から色度と輝度を算出することで、カラーフィルター用顔 料分散液の高色再現性を評価することが可能となる。

#### 1.5 本研究の目的及び本論文の構成

これまで述べたように、カラーフィルター用顔料分散液の開発には、分散液に含有する 顔料、顔料誘導体、分散剤、樹脂の各材料の新規材料の研究開発や、新規材料の配合設計 など、多くの課題を抱えており、顧客の要求項目を満たす製品を開発するには長期間を要 する。その一方で、研究目的で述べたように、市場の高い映像に対する要求が高く、毎年 要求品質が上がっている。さらに、バックライトの変更など技術革新により大きく研究開 発の方向性を大きく転換する必要にも迫られる。本研究は、これらの背景から、カラーフ ィルター用顔料分散液の材料設計者に早期に開発指針を出せるよう、顧客が指定する色度 において輝度が最大となるカラーフィルター用顔料分散液の透過スペクトルを数理最適化 で求めることを目指す。

本論文の以降の構成は以下の通りである。第2章では、測定した透過スペクトルなどの 離散データを関数化処理するための関数データ解析について述べる。第3章では、目的関 数を最小化(もしくは最大)する最適化問題について述べる。第4章では、第2章と第3章の 内容に沿って、取得データからの関数データ解析と最適化問題への定式化を行い、研究結 果について報告をする。第5章で本研究の内容を総括し、今後の展望を述べる。

# 第2章 透過スペクトルと関数データ化処理

# 2.1 透過スペクトルデータの取得と色度座標、輝度の算出

2.1.1 カラーフィルターの透過スペクトル測定と評価方法

本研究の実験では、色度・輝度を算出するために、ガラス基盤上に塗布したカラーレジ スト塗膜を測定試料とし、紫外可視分光光度計で指定波長*λnm*の透過率*T*(*λ*)を計測した。 まず紫外可視分光光度計の原理について、図 14 で簡略に述べる。

試料の透過率を広範囲の波長で測定するため、測定光源として可視・近赤外域において タングステンヨウ素ランプ(WI ランプ)、紫外域で重水素ランプ(D2 ランプ)を用いてい る。光源から発せられた連続光はスリットを通し、回折格子で分光して特定波長の単色光 を取り出し、セクター鏡にて時間的に二分して、試料セルとリファレンスセル(試料なし) を通す。そして光電子倍増管で透過した光を検出し、光量に応じて光電流を発生、増幅さ せて表示装置に入力している [9]。本研究では UV-2500PC(島津製作所 社製)を用いて試 料の 380nm から 780nm における透過率を測定した。サンプリング間隔は 5nm とした。



図 14 紫外可視分光光度計(文献[9]より引用)

紫外可視分光光度計で測定および計算される透過率は、ランベルト・ベールの法則で定 式化される。

・ランベルト・ベールの法則(Lambert-Beer law)

OD = 
$$\log_{10} \frac{I_{\text{reference}}(\lambda)}{I_{\text{sample}}(\lambda)} = \log_{10} \frac{1}{T(\lambda)} = \epsilon(\lambda) \text{ C d}$$

·透過率

$$T(\lambda) = \frac{I_{sample}(\lambda)}{I_{reference}(\lambda)} = 10^{-0D} = 10^{-\epsilon(\lambda)Cd}$$
OD : 光学密度(Optical Density)  
 $T(\lambda)$  : 波長 $\lambda$ nm における光の透過率  
 $I_{reference}(\lambda)$  : 波長 $\lambda$ nm におけるリファレンス通過後の光強度

$I_{sample}(\lambda)$	:波長 lmm における試料通過後の光強度
ε(λ)	:波長 <i>\</i> nmにおけるモル吸光係数
С	: 試料の濃度
d	: 試料の厚み

各波長λnm における光の透過率T(λ)は、光電子倍増管で検出した試料とリファレンスの光 強度の比から算出している。380nm から 780nm までの透過率をグラフ表示したものが透過 スペクトルである。透過スペクトルの例を図 15 に示す。



図 15 紫外可視分光光度計で得た透過スペクトル

# 2.1.2 XYZ 表色系 (CIE1931 表色系)

XYZ 表色系は、1931 年の国際照明委員会(Commission Internationale de l'éclairage)で採択さ れた等色関数に基づく三色表色系である。次式のように透過スペクトル*T*(λ)から三刺激値 XYZ を計算し、色度座標(x, y)を算出する。

・三刺激値 XYZ

・色度座標 (x, y)

$$x = \frac{X}{X + Y + Z}$$
,  $y = \frac{Y}{X + Y + Z}$ .

実際の測定においては、紫外可視分光光度計などで離散的にサンプリングしたデータから

算出するため、日本工業規格(JIS Z8781-3:2016) [1]では離散的な近似の規格として下記のように定義している。

$$\begin{split} \mathbf{X} &= \mathbf{K} \sum_{i} S(\lambda_{i}) \, \bar{x}(\lambda_{i}) \, T(\lambda_{i}) \, \Delta \lambda \\ \mathbf{Y} &= \mathbf{K} \sum_{i} S(\lambda_{i}) \, \bar{y}(\lambda_{i}) \, T(\lambda_{i}) \, \Delta \lambda \\ \mathbf{Z} &= \mathbf{K} \sum_{i} S(\lambda_{i}) \, \bar{z}(\lambda_{i}) \, T(\lambda_{i}) \, \Delta \lambda \\ \mathbf{K} &= \frac{100}{\sum_{i} S(\lambda_{i}) \, \bar{y}(\lambda_{i}) \, \Delta \lambda} \\ \Delta \lambda : = \Xi \eta \, \& dia \, \ddot{g} \, \mathcal{O} \, \mathcal{E} \, \mathcal{O} \, \mathcal{O} \, \mathcal{U} \, \mathcal{E} \, \Pi \, \square \, \square \, \mathcal{O} \, \mathcal{U} \end{split}$$

式より光源データ*S*(*λ*)と透過スペクトル*T*(*λ*)が得られれば、他の値は定義された規定値の ため、三刺激値と色度座標(*x*, *y*)が算出される。波長間隔Δλは JIS 規格にて 5nm 間隔の値を 取るように規定されており、各刺激値は 380nm、385nm、390nm、・・・、780nm の計 81 個 サンプリングした値を積算して計算される。カラーフィルター業界では、色を色度座標 (*x*, *y*)(図 16)で指定し、その(*x*, *y*)における刺激値 Y を輝度として評価することが多い。



図 16 XYZ 表色系による色度座標

日本工業規格(JIS Z 8720:2012) [10]においては、物体色の測色に用いる標準イルミナン ト(標準の光)及び補助標準イルミナント(補助標準の光)並びに標準光源及び常用光源につい て、光源の光強度分布*S*(*λ*)を規定している。パネルには様々なバックライト光があるが、 パネルメーカーの光源情報の非開示等により計算できない場合があるため、カラーレジス トを取り扱うメーカー間で議論する際には、日本工業規格に規定されている「補助イルミ ナントC」の数値(JIS Z 8720:2012 表 2)を用いて計算する場合が多い。 2つの試料色の三刺激値が等しいということは、用いた等色関数*x*(*λ*)、*y*(*λ*)、*z*(*λ*)(図 17) に対応する観測者が同一の観測条件で見たときに、両方の色の見え方が等しいことを意味 する。等色関数を用いれば、異なった時間および場所で得られた三刺激値を比較すること ができる [11]。各メーカーは情報の非開示など制約がある中、日本工業規格で定められた 定義式を用いることで、異なるメーカーの評価環境における測定値に差が生じないよう、 同条件下で新開発したカラーフィルター用顔料分散液の色度座標や輝度を評価している。 インキメーカーとレジストメーカーの 2 社が、各々が保有する紫外可視分光光度計を使用 して同じ顔料分散液の透過スペクトルを測定した場合、日本工業規格で保証・校正された 機器で測定し、同規格で定義された計算式で算出しているため、異なる測定環境であって も各々で算出した色度座標と輝度は基本的に合致することになる。



図 17 等色関数 $\bar{x}(\lambda)$ 、 $\bar{y}(\lambda)$ 、 $\bar{z}(\lambda)$ 

2 社間において新開発した顔料分散液の透過スペクトルについて議論する際には、透過 スペクトルの形状と、透過スペクトルから計算された色度座標(*x*, *y*)の値と輝度 Y の値につ いて、特に、同じ色度座標(*x*, *y*)において輝度 Y の値を上げるためには、どのようにスペク トル形状を変更すべきかが論点となる。しかし、図 18 に示すようにスペクトル形状と色度 座標や輝度との関係は自明ではなく、どの波長区間の透過率を上げれば同じ色度座標で輝 度が上がるかを推測することは困難である。そこで、透過スペクトルと色度座標や輝度の 関係を明らかにする必要がある。

本研究ではこの課題を解決するため、特定の色度座標において輝度が最大となる透過スペクトルを求める問題を数理最適化問題として定式化する。また、先述のように三刺激値 は本来、連続的なスペクトルの積分として定義される量であるが、実験で取得されるデー タが離散的なデータであるため、次章で述べる関数データ解析で関数化処理を行ない、等 色関数及び光源の光強度分布を用いて最適化問題を定式化した。



図 18 測定した透過スペクトルと、対応する色度座標(×印)と輝度

# 2.2 関数データ解析

# 2.2.1 関数データ解析

関数データ解析とは、各個体あるいは対象に対して、離散点で経時的に観測・測定され た一組のデータを滑らかな関数として捉え、この関数の集合からなるデータ、すなわち関 数データから有効に情報を抽出する手法として、Ramsay and Silverman (1997) [12]によっ て提唱されたものである。具体的には、経時測定を関数化処理し、得られた関数データ集 合を対象として回帰分析、時系列解析、空間データ解析などの分析を行う手法である [13]。 本研究の目的は、バックライトの光強度分布に合わせてカラーフィルター用顔料分散液の スペクトルの形を最適化することであり、指定された色度座標(x,y)において輝度 Y が最も 高くなる最適なスペクトルを算出することである。そこで、紫外可視分光光度計で測定し た 5nm 毎の離散データ(透過スペクトル)を関数データとして基底関数に重みを掛けた線形 結合の形で表現し、積分で定義される三刺激値を重みの線形演算で求める、という流れに なる。

# 2.2.2 補間

実験で得られた離散データから連続データを取得する手法の一つである補間について説 明する。xy平面上にN+1個の点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \cdots, (x_N, y_N)$ が与えられ、これらの点全てを通 る曲線を推定する。曲線を推定するということは、与えられた点以外の曲線上の点を推定 することである。すなわち、未知関数f(x)の値が、異なるN+1 個のx座標 $x = x_j$  ( $j = 0, 1, \cdots, N$ )に対してのみわかっているとき、 $x = x_j$ 以外での関数f(x)の値を推定する。

このとき、関数f(x)自体は未知であり、 $f(x_j)$ の値だけを手掛かりに推定しなければならない。このように、与えられた点以外における関数の値を推定することを補間という。補

間する曲線には、ラグランジュの補間多項式、スプライン補間などがある。どの曲線が最 も良いかは、応用する目的に応じて変わる。ラグランジュ補間多項式では、離散データ点 において曲線の傾きが不連続になるが、スプラインでは滑らかな曲線どうしを滑らかに接 続する。3 次スプラインS(x)は、区分 3 次多項式でS(x) =  $S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j$  ( $x_j \le x \le x_{j+1}$ )と定義される。3 次スプラインの曲線は次のように して求められる。3 次スプラインの条件として、曲線y = S(x)は連続であること、点 ( $x_j, y_j$ )(j = 0, 1, ..., N)を全て通り、区間の境目である $x = x_j$ (j = 1, 2, ..., N - 1)で、S(x)の1 階微分係数S(x)'及び2階微分係数S(x)"が連続であることの2つがあげられる。後者の条件 は区間の境目において曲線が滑らかであることを保証する。次に、曲線の両端の点 ( $x_0, y_0$ )、( $x_N, y_N$ )の2階微分係数を0とする: $S(x_0)'' = S(x_N)''$ (この場合のスプラインを自 然スプラインという)。これらの条件で連立方程式を解き 3 次スプラインS(x)の関数曲線が 求まる。スプライン補間は離散データの数を多くすればするほど近似の精度が良くなる [14]。本研究では、実用上よく使用される3次スプライン補間を用いることにより、離散デ ータ $S(\lambda)$ 、 $T(\lambda)$ 、 $\bar{x}(\lambda)$ 、 $\bar{y}(\lambda)$ 、 $\bar{z}(\lambda)$ を補間することで連続データにした。

# 2.2.3 基底関数展開

関数 $u(\lambda)$ は基底関数と呼ばれる既知の関数系 ( $\phi_1(\lambda), ..., \phi_m(\lambda)$ ) の線形結合で表される と仮定する

$$u(\lambda) = w_1 \phi_1(\lambda) + \dots + w_m \phi_m(\lambda) = \boldsymbol{w}^T \boldsymbol{\phi}(\lambda),$$
$$\boldsymbol{w} = (w_1, \dots, w_m)^T,$$
$$\boldsymbol{\phi}(\lambda) = (\phi_1(\lambda), \dots, \phi_m(\lambda))^T.$$

**w**は未知のパラメータ、 $\phi(\lambda)$ は基底関数からなるベクトル、基底関数の個数をmとしている。基底関数 $\phi(\lambda)$ の種類として単項式、フーリエ級数、 $B - \lambda^{-1}$ ラインなどが考えられている(図 19)。単項式からなる基底関数は $\phi_j(\lambda) = \lambda^j$ 、フーリエ級数からなる基底関数は $\phi_j(\lambda) = 1$  (j = 0),  $\phi_j(\lambda) = \sin((j+1)\omega\lambda/2)$  (j = 2l - 1),  $\phi_j(\lambda) = \cos(j\omega\lambda/2)$  (j = 2l) [ $\omega = 2\pi/T, T$ :時系列長]と定義される。基底関数には関数ごとに特徴があり、フーリエ級数は様々な周期の波で合成されている音声の解析などに用いられる。本研究では色度座標や輝度へ寄与する波長区間を特定するため、局所的な基底関数である $B - \lambda^{-1}$ ラインを用いる。次節では $B - \lambda^{-1}$ ラインの特徴について説明する。



2.2.4 **B**-スプライン

B-スプラインとは、スプライン補間で得られる滑らかな曲線を、区分的な多項式からな る基底関数の線形結合で表現したものである。関数の定義域[a,b]を分割するk個の点を { $a = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_{k-1} = b$ }とする。これらの点は節点(knot)とよばれる。スプライン 補間によく用いられるのは3次スプライン(cubic spline)で、これは各小区間 [ $t_0, t_1$ }, [ $t_1, t_2$ ],…, [ $t_{k-1}, t_k$ ]上で区分的に3次多項式を当てはめ、節点で滑らかに接続したも のである。10 個の3次*B*-スプラインでは380nmから780nmの区間に9 個の節点 {380,430,480,530,580 630,680,730,780}があり、節点で滑らかに接続して構成している (図 20)。



図 20 異なる次数のB-スプライン

いま*m*個の基底関数{ $b_1(\lambda), b_2(\lambda), \dots, b_m(\lambda)$ }を構成するために必要な節点 $t_i \ge t_1 < t_2 < t_3 < t_4 = \lambda_1 < \dots < t_{m+1} = \lambda_n < \dots < t_{m+4}$ とする。このように節点を取ることによって、*n* 個のデータは(*m* - 3)個の区間[ $t_4, t_5$ ], [ $t_5, t_6$ ], …, [ $t_m, t_{m+1}$ ]によって分割される。この節点を もとに*B*-スプライン基底関数を構成するには、次の de Boor のアルゴリズム [15]が用いられる。

一般に、r次のB-スプライン関数を $b_i(x; r)$ とおく。まず0次のB-スプライン関数を

$$b_j(\lambda; 0) = \begin{cases} 1, & t_j \leq \lambda \leq t_{j+1} \\ 0, & \mathcal{F} \mathcal{O} \& \end{cases}$$

と定義する。この0次B-スプライン関数から出発して、r次のB-スプライン関数は次のように逐次的に定義される:

$$b_{j}(\lambda;r) = \frac{\lambda - t_{j}}{t_{j+r} - t_{j}} b_{j}(\lambda;r-1) + \frac{t_{j+r+1} - \lambda}{t_{j+r+1} - t_{j+1}} b_{j+1}(\lambda;r-1).$$

図 21の左上から順に、0次、1次、2次、3次スプライン基底関数を示す。破線と交わる箇 所は、順に次数より1つ多い1、2、3、4個となっている。それぞれ1つの基底関数が、次 数より1つ多い個数の直線、2次多項式、3次多項式によって構成されており、また各区間 も同様に次数プラス1個の基底関数で(部分的に)覆われている。つまり、ある特定区間にお いては次数プラス1個の基底関数のみが非零となり、その他の基底関数の値は0となる。言 い換えれば、特定の基底関数が非零となる、すなわち関数値に寄与するのは限られた区間 のみである。各基底関数の係数をうまく推定することで、連続データを以下の滑らかな曲 線で表現できる:

$$y_i = \sum_{j=1}^m w_j b_j(\lambda_i; 3) \qquad i = 1, 2, \cdots n.$$

関数はm個の基底関数の線形結合で表現されるが、3次B-スプラインの拡大図で確認する と、破線部のあるλにおいては4点と交差しており、実際にはある特定の波長における値は 4 つの基底関数の線形結合で表すことができる。スプラインを適用する場合、節点の個数 と位置を決める問題が残る。節点の個数と位置を決める 1 つの方法としては、節点をデー タが観測される範囲に等間隔に配置して、当てはめる曲線の滑らかさを節点の個数によっ て調整する方法が考えられる[16]。本研究では、測定点を 380nm から 780nm の 5nm 間隔の 81 個でサンプリングしている。透過スペクトルの測定点をB-スプラインで基底関数展開す ると、各基底関数は特定の限られた波長領域でのみ非零となるので、特定の基底関数係数 を大きくすることが特定の波長を透過させることに対応する。そこで、輝度や色度座標に 関連する波長領域を特定するために、3次B-スプライン基底関数を用いた。基底の数が多 いほど線形結合でより複雑な曲線を表現できるため、最適化で得られるスペクトルも複雑 で顔料分散液の透過スペクトルとして実現不可能なものになる可能性がある。そこで、基 底数 78 個を最大として個数を変化させ、それぞれについて最適となるスペクトルを探索し、 検討した (図 22)。3次B-スプライン基底関数を用いた連続データへの変換には、関数デー 夕解析を行うための Python パッケージである scikit-learn fda [17]を使用した。



図 21 B-スプライン基底関数。左上から順に、0次、1次、2次、3次のB-スプライン基底関数 を示す。破線と交わる箇所は、順に次数より1つ多い1、2、3、4個となっている。



図 22 基底数の異なる 3 次B-スプライン

# 第3章 最適化問題

## 3.1 最適化問題

最適化問題とは、与えられた条件のもとで、ある関数を最小にする解(あるいは、最大に する解)を求めることをいう。多くの最適化問題は、集合Sと関数 $f: S \to \mathbb{R}$ が与えられたと きに、「条件 $x \in S$ を満たすxのうち、f(x)を最小にするものを求める問題」と表現すること ができ、

# minimize f(x),

# subject to $x \in S$ ,

と記述される。この最適化問題に対して、f(x)を目的関数、Sを実行可能領域、条件 $x \in S$ を制約と呼ぶ。また制約を満たす点(つまり、 $x \in S$ を満たす点x)を実行可能解と呼ぶ。 そして、f(x)の最小値を達成する実行可能解を最適解と呼び、最適解における目的関数 f(x)の値を最適値と呼ぶ。これらの用語を用いると、最適化法とは、目的関数と実行可能 領域が与えられたときに最適解を求めるための理論や手法ということができる [18]。 最適化問題の具体事例としては、「限られた投資で、収益を最大にしたい」、「所定の強度 があってできるだけ軽い車を作りたい」、「時間内に最大の効果をあげたい」、「限られた燃 料で飛行距離を最大にしたい」、「限られたコストでできるだけ大きなものを作りたい」と いった例が挙げられる。これらのような事象を制約条件の下で目的関数を最小化(もしくは 最大化)する形の最適化問題として定式化し、その解を求める。

# 3.1.1 最適化問題の分類

最適化問題は、変数、目的関数、制約条件の種類によって、いくつかの問題クラスに分 類することができる。問題クラスによって適切な解法や理論が異なるため、実際に解きた い最適化問題がどのような種類の問題かを認識することは極めて重要である。まず変数が 連続的な実数値を取る問題を連続最適化問題、変数が 0 か 1 のように離散的な値をとる場 合には、離散最適化問題とよぶ。図 23 は連続最適化問題に属する代表的な数理計画問題の クラスとそれらの包含関係を示したものである。まず大きく 2 つに分けると凸計画問題と 非凸計画問題に分けることができる。実行可能集合 S が凸集合で、目的関数 f(x) が S を含む 凸集合上で凸関数である場合には凸計画問題になる。凸計画問題には線形計画問題だけで なく、凸 2 次計画問題や半正定値計画問題などの非線形計画問題も含まれる [18]。凸計画 問題は、局所最適解が大域的最適解に一致するという良い性質がある。本研究で扱う最適 化問題は最も基礎的な凸計画問題である線形計画問題として定式化される。



図 23 さまざまな凸計画問題(文献[18]より引用)

# 3.1.2 線形計画問題

線形計画問題とは、目的関数が線形でかつ制約式も線形であり、効率的に解くことがで きる最適化問題である。線形計画問題は次のように表される

> 最小化 minimize  $c \cdot x$ , 制約条件 subject to A x = b,

 $x \ge 0$  ( $\forall i, x_i \ge 0$ ).

ここで、 $c \in \mathbb{R}^n$ 、 $x \in \mathbb{R}^n$ はn次元の実ベクトル、 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は $m \times n$ の実行列、 $b \in \mathbb{R}^m$ はm次元の実ベクトルとする。また $x \ge 0$ はxの各要素 $x_i$ が非負であることを表す。さらに、 $x \cdot y$ は $\sum_{i=1}^n x_i y_i$ で定義される通常の内積とする。この定式化での制約式A x = bをm個の制約に分けると、次のように書くことができる

制約条件  $a_i \cdot x = b_i$  (*i* = 1, 2, …, *m*).

ここで、n次元の実ベクトル $a_i \in \mathbb{R}^n$ は、行列Aの第i行を表し、 $b_i$ はbの第i成分を表すものとする。すなわち、制約式A x = bはm個の制約式 $a_i \cdot x = b_i$ を並べたものとみることができる [19]。

#### 3.1.3 Python パッケージによる数理最適化問題のモデリング

Python では数理最適化を解くための様々なパッケージが利用可能である。これらのパッケージを用いると、数理最適化問題を解くプログラムを人間に読みやすい形で作成できる。 Python を用いて数理最適化問題を解くには、まず、モデリング言語を用いて問題を記述し、 その記述したものをソルバとよばれるソフトウェアに渡す。ソルバは受け取った最適化モ デルを解くためのアルゴリズムを実行し、最適解を求める(図 24)。

モデリング言語には様々なものがあり、それぞれ扱うことのできる数理最適化問題のク ラスが異なる。線形計画問題・混合整数線形計画問題のみを扱うことのできるものもあれ ば、錐線形最適化問題のみを扱うことができるものもある。線形計画問題は、現在最も広 く用いられている最適化問題であり、複数のインターフェイスが利用可能である。PuLP、 Pyomo、PICOS などがあり、本研究では PICOS を用いた。PICOS は整数最適化問題と錐線 形最適化問題のためのインターフェイスを提供するパッケージである。PICOS は線形最適 化以外にも二次錐最適化問題、半正定値最適化問題、二次制約付き二次最適化問題、混合 整数線形最適化問題、混合整数二次錐最適化問題を扱うことができる。使用できるソルバ は CPLEX、CVXOPT、ECOS、GLPK、Gurobi、MOSEK、SMCP、SCIP がある [19]。



図 24 モデリング言語とソルバによる求解(文献[19]より一部改変)

# 第4章 最適化問題としての定式化とその結果

この章においては、第3章で述べた内容に沿って、本研究の目的である所望の色度で輝 度を最大化する透過スペクトルを求める問題を最適化問題として定式化する。

# 4.1.1 離散データの連続データへの補間

三刺激値の算出に必要な光源の光強度分布 $S(\lambda)$ 、XYZ 表色系における等色関数 $\bar{x}(\lambda)$ 、  $\bar{y}(\lambda), \bar{z}(\lambda)$ は 5nm 間隔( $\Delta\lambda$ )の離散データである。実験で得られる透過スペクトル $T(\lambda)$ は測 定装置で得ているため、観測値と測定データに大きな誤差が生じる可能性は低いが、 0.5nm 間隔で細かくサンプリングし、測定機器の仕様で精度を上げている。これらの離散 データは、元々はある波長 $\lambda$ nm に対するバックライトの光源 $S(\lambda)$ 、インキの透過率 $T(\lambda)$ で あるので、本来は可視光領域(380nm から 780nm)における連続的な滑らかな連続関数の一 点である。2章で述べたように XYZ 表色系は連続な関数の積分として定義されるので、光 強度分布や等色関数は、本来は連続関数として扱われるものとして考え、関数データ解析 を行うために全ての離散データに対して 3 次スプライン補間を行った。Python のライブラ リ scikit-fda [19]を用いて、補間の種類、基底関数の種類、基底の数を指定したもとでデー タの補間と基底関数による展開を行った。

# 4.1.2 **B**-スプラインによる基底関数展開

基底関数展開の流れを説明するにあたって、 $T(\lambda)$ 、 $S(\lambda)$ 、 $\bar{x}(\lambda)$ 、 $\bar{y}(\lambda)$ 、 $\bar{z}(\lambda)$ を連続デー タとし、5nm間隔で 81 個サンプルリングした値を積算した値( $K\sum_i S(\lambda_i)\bar{x}(\lambda_i)T(\lambda_i)\Delta\lambda$ )を三 刺激値X, Y, Z、連続データで積算され求まる値( $K\int_{380}^{780} S(\lambda)\bar{x}(\lambda)T(\lambda)d\lambda$ )を三刺激値X', Y', Z'とする。透過スペクトル $T(\lambda)$ をm個の基底関数 $\phi(\lambda)$ で基底関数展開すると下記のようにベ クトル表記で表せる

 $T(\lambda) = w_1 \phi_1(\lambda) + \cdots + w_m \phi_m(\lambda) = \boldsymbol{w}_t^T \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}),$ 

 $w_t$ :基底関数係数,

**φ(λ)**:基底関数.

次に、光源S( $\lambda$ )と等色関数 $\overline{x}(\lambda), \overline{y}(\lambda), \overline{z}(\lambda)$ を同じm個の基底関数 $\phi(\lambda)$ で展開し、その係数を $w_x, w_y, w_z$ とする。光源と等色関数の積は下記のように表すことができる

$$S(\lambda)\overline{\mathbf{x}}(\lambda) = \mathbf{w}_{x}^{T} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}),$$
  

$$S(\lambda)\overline{\mathbf{y}}(\lambda) = \mathbf{w}_{y}^{T} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}),$$
  

$$S(\lambda)\overline{\mathbf{z}}(\lambda) = \mathbf{w}_{z}^{T} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}).$$

よって刺激値X'は下記のように求めることができる

$$X' = K \int_{380}^{780} T(\lambda) S(\lambda) \bar{x}(\lambda) d\lambda,$$
  
=  $K \int_{380}^{780} \boldsymbol{w}_t^T \boldsymbol{\phi}(\lambda) \boldsymbol{w}_x^T \boldsymbol{\phi}(\lambda) d\lambda,$   
=  $K \int_{380}^{780} \boldsymbol{w}_t^T \boldsymbol{\phi}(\lambda) \boldsymbol{\phi}(\lambda)^T \boldsymbol{w}_x d\lambda,$ 

$$= K \boldsymbol{w}_{t}^{T} \int_{380}^{780} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}) \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda})^{T} d\boldsymbol{\lambda} \boldsymbol{w}_{x},$$
$$= K \boldsymbol{w}_{t}^{T} \Phi \boldsymbol{w}_{x},$$
$$\left(\Phi = \int_{380}^{780} \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda}) \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{\lambda})^{T} d\boldsymbol{\lambda}\right).$$

刺激値Y',Z'についても同様にして求められる。基底関数係数はm個の基底関数の重みであ るため、m次元のベクトルとなる。波長間隔∆λが十分小さければ X≒X'となる。 よって三刺激値 XYZ を下記のように近似できる

$$X \approx K w_t^T \Phi w_x,$$
  

$$Y \approx K w_t^T \Phi w_y,$$
  

$$Z \approx K w_t^T \Phi w_z.$$

これを用いると色度(x, y)は、

$$x = \frac{X}{X + Y + Z} = \frac{K w_t^T \Phi w_x}{K w_t^T \Phi w_x + K w_t^T \Phi w_y + K w_t^T \Phi w_z}$$
$$= \frac{w_t^T \Phi w_x}{w_t^T \Phi w_x + w_t^T \Phi w_y + w_t^T \Phi w_z}$$
(1)

$$y = \frac{Y}{X + Y + Z} = \frac{K w_t^T \Phi w_y}{K w_t^T \Phi w_x + K w_t^T \Phi w_y + K w_t^T \Phi w_z}$$
$$= \frac{w_t^T \Phi w_y}{w_t^T \Phi w_x + w_t^T \Phi w_y + w_t^T \Phi w_z}$$
(2)

となる。この一連の計算により、離散データの積和である三刺激値および色度をベクトルの演算として表現することができた。

# 4.1.3 最適化問題

本研究の目的を達成するためには、指定された色度座標において、どの波長区間の透過 率を上げれば輝度(刺激値 Y)の値が上がるかを議論できるようにすることが必要である。 指定された色度座標(x,y)が(a,b)であったとしたときの刺激値 Y について考える。 式(1)にx = aを代入すると、

$$a = \frac{\boldsymbol{w}_t^T \Phi \, \boldsymbol{w}_x}{\boldsymbol{w}_t^T \Phi \, \boldsymbol{w}_x + \boldsymbol{w}_t^T \Phi \, \boldsymbol{w}_y + \boldsymbol{w}_t^T \Phi \, \boldsymbol{w}_z},$$
$$a \, \boldsymbol{w}_t^T \Phi \left\{ \boldsymbol{w}_x + \boldsymbol{w}_y + \boldsymbol{w}_z \right\} = \boldsymbol{w}_t^T \Phi \, \boldsymbol{w}_x ,$$
$$\boldsymbol{w}_t^T \Phi \left\{ (1-a) \, \boldsymbol{w}_x - a \left( \boldsymbol{w}_y + \boldsymbol{w}_z \right) \right\} = \boldsymbol{0} , \qquad (3)$$

となる。同様にして式(2)に
$$y = b$$
を代入すると、  
 $w_t^T \Phi \{(1-b) w_y - b (w_x + w_z)\} = 0$  (4)  
となる。これら式(3)と式(4)は、ベクトル の内積が 0 であり、ベクトルが直交する

ことを意味している。

 $\boldsymbol{w}_t^T \perp \Phi\left\{ (1-a) \, \boldsymbol{w}_x - a \big( \boldsymbol{w}_y + \boldsymbol{w}_z \big) \right\},\tag{5}$ 

 $\boldsymbol{w}_{t}^{T} \perp \Phi \left\{ (1-b) \, \boldsymbol{w}_{y} - b(\boldsymbol{w}_{x} + \boldsymbol{w}_{z}) \right\}. \tag{6}$ 

式(5)と式(6)の右辺をベクトル $C_x, C_y$ とおくと、

$$w_t^T C_x = \mathbf{0},$$
$$w_t^T C_y = \mathbf{0},$$

という条件が得られる。つまり色度座標が(a,b)と定まると、設定した基底関数の数に対応 するm次元の空間内におけるベクトル $C_x$ ,  $C_y$ が定まり、それらと直交する $w_t^T$ の方向に透過 スペクトルが定まることを示している。輝度 Y は

$$\mathbf{Y} = \mathbf{K} \boldsymbol{w}_t^T \, \Phi \, \boldsymbol{w}_{\boldsymbol{v}},$$

であるから、輝度 Y が最大になるときのw<sup>T</sup>は、最も理想的な透過スペクトルの基底関数係数となる。したがって、指定された色度座標で輝度を最大化する透過スペクトルを求める問題は、以下の線形計画問題として定式化できる

最大化 maximize 
$$K w_t^T \Phi w_y$$
,  
制約条件 subject to  $w_t^T C_x = 0$ ,  
 $w_t^T C_y = 0$ .

透過スペクトルは基底関数 $\phi(\lambda)$ に係数を掛けた $w_t^T \phi(\lambda)$ で表記され、透過率は0から1の範囲にあることから、 $0 \le w_t^T \phi(\lambda) \le 1$ も制約条件となる。よって本研究では下記の最適化問題を解くことになる。

最大化 
$$\underset{w_{t}}{maximize} K w_{t}^{T} \Phi w_{y},$$
  
制約条件  $subject to w_{t}^{T} C_{x} = 0,$   
 $w_{t}^{T} C_{y} = 0,$   
 $0 \le w_{t}^{T} \phi(\lambda) \le 1.$ 

#### 4.1.4 顧客指定色度における輝度最大化の検証実験

前節で定義した最適化問題に顧客が指定する色度座標(表 4)を入力して解くことで、理想 のスペクトル*w<sup>T</sup>φ*(*λ*)を算出する。その結果に対して、サカタインクスが保有する実際の透 過スペクトルデータと比較することで、顧客の求める輝度値、理想のスペクトル、実デー タを比較し、どの領域の波長区間の透過率が輝度を高くすることに効果的かを考察する。 算出した理想のスペクトルの輝度 Y の値については、顧客が指定した輝度 Y(目標値)を 100 として換算したパーセント値で記載する。

光源:C光源	Х	у	Y(目標値)	Y(%表示)
Red	••••	••••	••••	100
Green	••••	••••	••••	100
Blue	••••	••••	••••	100
White	••••	••••	••••	100

表4顧客が指定する色度座標と目標にする輝度値

(情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)

今回の光源はC光源が指定されているが、図25のように他光源と比較すると、光源ごと にどの波長区間の透過率が高くなれば輝度が高くなるかが視覚的にわかりやすくなる。



図 25 光源(左図)と、光源×等色関数(右図)

輝度値の算出方法は、380nm から 780nm における光源と緑色の等色関数yと透過スペクト ルの積算値であるので、輝度を高くするには等色関数y(*λ*)と透過スペクトルが重なる面積 を大きくして積算値が大きくするのが望ましい。その一方で色度座標を指定されているた め、その透過スペクトルの形は制限される。このような見方でグラフを観察すると、透過 スペクトルの形が輝度と色度座標にどのように影響を与えているかが視覚的に把握しやす い。図 25 の左図のように、C 光源は他光源と比較すると、全波長領域においてピークが発 生しておらず、なだらかな形であるため、等色関数y(λ)を掛けても大きく変動しない形に なっている。C 光源は 550nm 前後の波長領域の透過率が高いほど輝度が高くなる光源であ ることがわかる。図 26 に色度座標 赤(●●●●,●●●●)における実データの透過スペクトルと、 C 光源と等色関数y(λ)を積算した関数を表した。黒い曲線で表した透過スペクトルに対し て、緑の曲線で表した C 光源の光強度分布と等色関数y(λ)を積算した関数を掛けた値を、 赤色のバープロットで示している。バープロットは各波長区間における輝度に相当し、そ れらを積算すると透過スペクトルの輝度 Y となる。この透過スペクトルの場合は、緑色の 関数と重なる波長区間の 570nm から 700nm で輝度を稼いでおり、輝度に影響しない 380nm から 420nm と 700nm から 780nm の透過率を調整することで、高い輝度を維持しつつ色度座 標を調整していると捉えることができる。



(情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)

次に、実際に指定された C 光源と色度座標((x,y) = 赤(●●●●,●●●●)、緑(●●●●,●●●)、緑(●●●●,●●●))の値を入力して制約条件を定め、基底関数の数mを調整して最適化問題を解 く。基底関数の数mは3次B-スプラインを基底関数としているため、m = 4が最小となる。 基底の数をサンプリング間隔に最も近いm = 78まで1つずつ増やして最適化スペクトルの 形状を観察した。各色度座標の m = 10,20,30,40,50,60,70,78の最適化スペクトルを図 27、 図 28、図 29に示した。また、基底の数mに対して、最適化スペクトルの輝度をプロットし たグラフを図 30、図 31、図 32 に示した。その結果、基底の数mを増やすほど、最適化ス ペクトルの輝度が上がる結果となった。mが小さいと透過スペクトルを表現する自由度が 低いため、解けた最適解は目標値に達することはないが、mを大きくすると最適化スペク トルの自由度が大きくなり、より輝度が高くなる最適解を得ることができたと考えられる。 図 33、図 34、図 35 にm = 78における最適解を示す。



(情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)



(情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)





図 30 色度座標 赤(●●●●, ●●●●)における基底数ちがいの最適化スペクトルの輝度 (情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)



図 31 色度座標 緑(●●●●,●●●)における基底数ちがいの最適化スペクトルの輝度 (情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)



図 32 色度座標 青(●●●●, ●●●●)における基底数ちがいの最適化スペクトルの輝度 (情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)



図 33 色度座標 赤(●●●●, ●●●●)の最適化スペクトル(m = 78)と実データの比較



図 34 色度座標 緑(●●●●, ●●●●)の最適化スペクトル(m = 78)と実データの比較



図 35 色度座標 青(●●●●, ●●●●)の最適化スペクトル(m = 78)と実データの比較 (情報資産保護のため一部黒塗り、非公開)

赤の最適化スペクトルについては、基底関数の数を増やすにつれて、長波長側の透過率 が高くなり輝度も上昇する傾向が読み取れる(図 27)。しかし、長波長側だけ透過率を上げ ると指定の色度座標から外れるので、短波長側の透過率を調整することで目標の色度座標 を実現している (図 33)。実データの赤の透過スペクトルも、1 つの顔料のみで作製された 顔料分散液で構成されていない。450nm 以下の短波長領域を透過する青味の赤色顔料を含 む、複数の顔料分散液を混合することで色度座標赤(●●●●,●●●●)の輝度が高くなるように 調色している。これらの事実は、数理最適化の結果と実務経験の知識が一致する結果にな ったと言える。カラーフィルター業界で赤色を調色する際に使用されるスペクトル顔料の 種類は限られてはいるが、その制約の中で研究者が経験や知識で調整した色味と、数理的 な最適解が同じ傾向を示したということは、研究開発の方向として正しい方向を向いて研 究開発をしていたと考えられる。また、緑の最適化スペクトルについても、実データと同 様の傾向が観察される。最適化スペクトルは基底関数の数を増やすにつれて、光源 C と等 色関数y(λ)を積算した関数のピーク値付近である 550nm あたりの波長領域の透過率を上げ ることで、輝度を稼ぐ挙動を示す。m = 70以上となると、長波長領域の透過率を上げて目 標の色度座標を実現している(図 34)。緑についても数理的な最適解と、研究者の経験や知 識で調整した色味が同じ傾向を示す結果となっている。その一方で、青の最適化スペクト ルは、実データのスペクトルと傾向が異なる結果となっている。青の実データは、550nm 以下の波長領域の透過率を上げることで色度座標を調整し輝度を最大化している。一方で、 最適化スペクトルは 550nm 以下の波長領域だけではなく、輝度とは影響しない 650nm 以上 の波長領域の透過率を上げることで、色度座標を調整して輝度を上げていることが観察さ れる(図 35)。この結果について数理最適化の観点からは、青については従来と違う戦略で スペクトルを調整することで、実データよりもさらに輝度を上げることができる可能性が あるということを示す結果となっている。

# 第5章 結論と今後の展望

本研究の目的は、技術革新により切り替わるバックライト に対して、顧客が指定する色 度座標における輝度の目標値を超えるカラーフィルター用顔料分散液の透過スペクトルを 数理最適化で算出し、カラーフィルター用顔料分散液の材料設計者に早期に開発指針を出 すことであった。研究の結果、日本工業規格で定義された三刺激値と色度座標の算出式に 使用される離散データを連続データとして基底関数展開を行うことにより、透過スペクト ルの特定の波長領域ごとに輝度への寄与を評価することができるようになった。また線形 計画問題として定式化したことにより、輝度を最大化する透過スペクトルを算出でき、顧 客指定の色度座標における輝度の目標値を超える透過スペクトルを可視化することができ た。そのため、今後は顧客から別の光源や色度座標を指定されたとしても、その制約条件 下の最適化問題を解くことで、輝度を最大化する透過スペクトルを可視化できるため、材 料開発の研究者が、どの波長領域の透過率を上げることが輝度を高くすることに繋がるの かを把握した上で、研究開発に取り組むことができる。今回の実験では、赤、緑、青のす べての指定色度において目標値よりも高い輝度を持つ透過スペクトルを可視化することが できた。実データと比較すると、赤と緑の透過スペクトルの形状は、数理最適解が示した 透過スペクトルの形状に近い一方で、青については、特定波長領域における透過率が異な る傾向を示す結果となった。現実的にはカラーフィルター用顔料分散液として分散可能な 顔料が数種類と限られているため、数理最適解が示す透過スペクトルに調整することが困 難であるかもしれないが、染料など顔料以外の有色化学物質を応用適用することにより調 整できることを視覚的に提示できたことは、材料開発のブレークスルーを誘発する非常に 有意義なものとなった。

本研究の今後の方針としては、数理最適解が示す透過スペクトルに調整することが現実的に困難である可能性があるため、実際の顔料分散液のデータで分析する課題に取り組む ことである。今回は輝度を最大化するスペクトルとして $T(\lambda) = w_1 \phi_1(\lambda) + \cdots + w_m \phi_m(\lambda) = w_t^T \phi(\lambda)$ ,とおいたが、次の研究として $T(\lambda) = a_1 R_1(\lambda) + \cdots + a_n R_n(\lambda) = a^T R(\lambda)$ ,とおき、n個の実在のスペクトルデータ $\{R_1, R_2, \cdots, R_n\}$ とその混合比率  $\{a_1, a_2, \cdots, a_n\}$ の内積 $a^T R(\lambda)$ で表現し直すことで、輝度を最大化する混合比率 $a^T$ を求める 最適化問題として定式化でき、最適な混合比率を算出できると考えている。この課題をさらに解決すると、本研究の最適化スペクトルの知見と、現実的に最適な透過スペクトルの 混合比率の知見を得ることができるため、より生産的かつ効率的な研究開発に取り組むこ とができると考えられる。その結果として、市場が求める要求に応じたカラーフィルター 用顔料分散液を迅速に開発し、社会に彩色豊かな映像が提供できると考えられる。今後は その展望を青写真として描き、本研究をさらに進捗できるよう努める所存である。

#### 謝辞

本論文の執筆にあたり、多くの方々からのご指導とご協力を頂くことで進めることができま した。暖かい激励とご指導、ご鞭撻を頂いた主指導教員のデータサイエンス研究科の岩山准教 授に感謝の意を表します。研究を始めた当初はデータがなく、研究の方向性さえ定めることが できず悩む期間が続きましたが、お忙しいなか弊社の抱える研究課題に対して真摯に議論を重 ねて頂いた結果、最終的に研究成果を出すことができ、修士論文を執筆することができました。 先生と同世代であるため、お気遣い頂くことも多かったと思います。心から感謝の意を申し上 げます。また、副指導教員の和泉教授には私の研究についての指導だけではなく、様々なご助 言を頂きました。滋賀大学に入学直後は今まで触れたことのない膨大な専門用語に困惑してい ましたが、適宜ご助言を頂いたことで勉学に勤しむことができました。心より感謝の意を申し 上げます。また、副指導教員の松井准教授から数理解析手法のご提案とご指導を頂きました。 授業で紹介して頂いた「関数データ解析」と出会わなければ、本研究に取り組むことができな かったと思います。研究初期に本研究の方向性についての相談を受けて頂き、また適宜多くの ご指導を頂きました。心より感謝の意を申し上げます。そして会社派遣という形式で本研究を 実現した、サカタインクス株式会社の寛大な対応に感謝申し上げます。そして滋賀大学大学院 の同期の皆様には、2年間という短い期間ではありましたが、共に悩み励ましあいながら研究 活動を歩めたことを心より感謝申し上げます。

# 引用・参考文献

- [1] JIS Z 8781-3:2016, "*測色 第3 部:CIE 三刺激值*,"日本工業規格, 2016.
- [2] 経済産業省資源エネルギー庁,"省エネ性能カタログ2020年版",2020. https://seihinjyoho.go.jp/frontguide/pdf/catalog/2020/catalog2020.pdf
- [3] R. Young, J. Lee, Y. Tamura and S. Matsuno, "*Quarterly Display Capex and Equipment Report*," DSCC, 2021.
- [4] 富士キメラ総研, "2019 ディスプレイ関連市場の現状と将来展望," 2019.
- [5] 西久保晴彦, "*図解入門よくわかる最新ディスプレイ技術の基本と仕組み*,"秀 和システム, 2003.
- [6] 応用物理学会, *会誌「光学」デジタルアーカイブ*, 43巻,7号, p.335, 2014. https://annex.jsap.or.jp/photonics/kogaku/public/43-07-kougakukoubou.pdf
- [7] J. Chen, "Wide Color Gamut Displays Are Here. What's Next ?," Nanosys, Inc, P.5, 2013.
- [8] 谷口彰敏, "カラーフィルター最新技術動向~構成材料・製造・評価・海外動 向~," 情報機構, 2005.
- [9] 大泊研, "Mach-Zehnder 型干渉計で計測した光架橋性ポリマーフィルムの変形 とその緩和挙動に関する研究,"京都工芸繊維大学修士論文, p.26, 2007.
- [10] JIS Z 8720: 2012, "*測色用の標準イルミナント(標準の光)及び標準光源*,"日本工業規格, 2012.
- [11] JIS Z 8781-1:2012, "*測色-第1部: CIE 測色標準観測者の等色関数*,"日本工業 規格, 2012.
- [12] J. O. Ramsay, B. W. Silverman, "Functional Data Analysis," Springer Series in Statistics book series, Springer Nature Switzerland AG, 2005.
- [13] 松井秀俊, "*関数データに基づく統計的モデリング*," 統計数理, Vol.67, No, 1, 73-96, 2019.
- [14] 高橋大輔, "*数値計算(理工系の基礎数学 8)*", 岩波書店, 1996.
- [15] G.Farmin, "Curves and Surfaces for CAGD, 5th Ed.," Morgan Daufmann, 2001.
- [16] 小西貞則, "多変量解析入門-線形から非線形へ", 岩波書店, 2010,
- [17] Automático, Grupo de Aprendizaje, "scikit-fda functional data analysis in python," https://fda.readthedocs.io/en/latest/ [2021.12.16 アクセス].
- [18] 東京大学工学教程編纂委員会, "*東京大学工学教程 基礎系 数学 最適化と変分 法*," 丸善出版, 2014.
- [19] 小林和博, "Python による問題解決シリーズ2 最適化問題入門-錐最適化・整数 最適化・ネットワークモデルの組み合わせによる-,"近代科学社, 2020.