

機械学習で砂糖と塩を見分ける

～熟練研究者の「眼」を機械学習で実現、化学反応の画像解析に応用～

ポイント

- ・砂糖と塩のような固体混合物の画像に対し機械学習を活用した混合比予測システムを構築。
- ・結晶多形や鏡像異性体の混合比、固相反応の収率予測も達成。
- ・スマートフォンのような携帯端末のカメラ機能による画像でも予測が可能。

概要

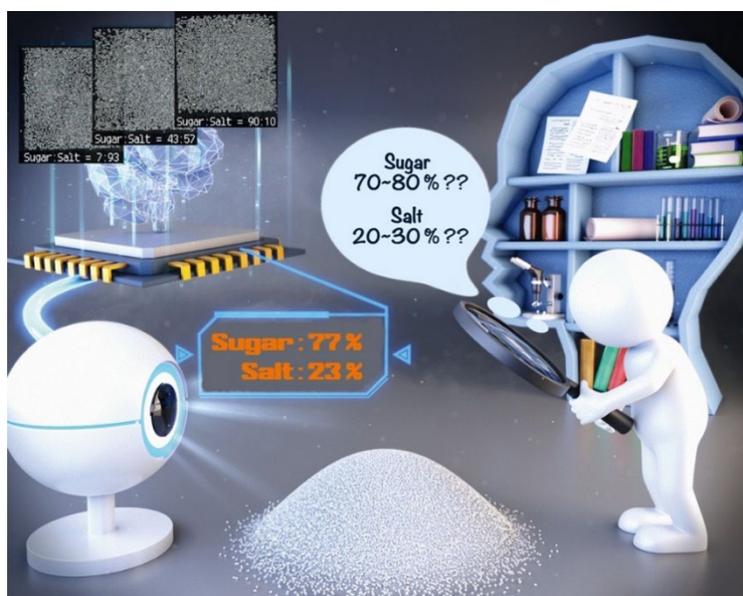
北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点（WPI-ICReDD）の猪熊泰英教授、瀧川一学特任教授、井手雄紀特任助教らの研究グループは、機械学習を使って固体混合物の写真から混合比率を予測するシステムを開発しました。このシステムは、熟練した研究者の観察眼に代わる化合物分析や反応観測手段としての応用が期待されます。

化学研究における重要な発見の多くは、研究者の鋭い観察眼によってもたらされています。本研究では、長年の経験をもって培われる熟練研究者の観察眼を、機械学習によって再現することで、初心者にも共有可能な予測システムを構築することに取り組みました。

研究グループは、最も身近にある混同しやすい固体化合物として、砂糖と塩の混合物の分析を行いました。混合物の写真 300 枚とそれぞれの混合比率を用意して機械学習モデルを作成したところ、人間の観察眼を上回る平均誤差約 4% で混合比予測に成功しました。同様のシステムを用いることで、専門的な分析装置を用いても判別が難しい結晶多形の比率や鏡像体過剰率、固体反応の収率予測も高精度で行うことができました。携帯端末付属カメラの画像でも適用可能であり、この機械学習システムは Web 上のサービスを介して、誰でも使用することができます。

このシステムは、化学プラントにおける反応モニターシステムやロボット合成の分析装置への応用のみならず、研究者の育成や目の不自由な人の研究サポートにも役立つことが期待されます。

なお、本研究成果は、2023 年 8 月 23 日（水）公開の Industrial & Engineering Chemistry Research 誌にオンライン掲載されました。



熟練研究者の観察眼を本研究にて開発した画像を用いた機械学習システムにより再現。

【背景】

熟練した研究者と初心者の違いは、観察眼にあると言われます。世紀の発見とも言われる分子キラリティーは、ルイ・パスツールが酒石酸塩の結晶を注意深く観察したことでもたらされました。非常に高精度の分析装置が多く開発された現在においても、研究における重要な発見が、研究者たちの目視観察に端を発することは少なくありません。しかし、このような熟練した研究者の観察眼はデータ化して共有することが難しく、初心者にとっては長い時間をかけて成功と失敗を経験しなければ得ることができないものでした。

猪熊教授らの研究グループは、熟練の研究者たちが視覚的な情報をもとに培ってきた経験と勘を機械学習によって再現することに挑戦しました。そして、人間の観察力を超える精度と再現性で写真から化合物の成分比率を予測することに成功しました。

【研究手法】

研究グループは、熟練した研究者が時として混合物から目的物の含まれる割合を瞬時に予測するという観察眼に着目し、シンプルな機械学習の課題を設定しました。それが、最も身近で混同しやすい砂糖と塩の混合比予測です。人間が学習する時と同様に、様々な比率で混合した砂糖と塩の写真（図1）を300枚撮影し、それぞれの成分比率とセットにすることで機械学習の教師データを作成しました。そのデータをもとに畳み込みニューラルネットワークを用いて機械学習モデルを作成し、テスト用の画像100枚を用いて混合比率予測の精度を評価したところ、実際の混合比と機械学習による予測値の平均誤差が約4%という高い精度が得られました（図2）。これは熟練した研究者の観察眼を遙かに上回る予測精度です。

【研究成果】

この機械学習による予測システムは、最先端の研究にも十分活用できることが分かりました。専門的な装置を使っても判別が難しい結晶多形の混合比や鏡像異性体比率までも、写真1枚から誤差10%未満の精度で予測できることが分かりました（図3）。分析する固体化合物ごとに300枚程度の写真（教師データ）を必要とはするものの、ひとたび機械学習モデルを構築すれば100枚の画像であっても2分程度で一気に比率を予測することができます。また、予測対象を化学反応の原料と生成物に置き換えることで、固体反応の収率をモニターするシステムにも応用することができました（図4）。さらに、この予測システムに用いる画像はスマートフォンのような携帯端末に付属しているカメラ画像でも適用することができました。開発された予測システムのソースコードは一般公開されており、Google社が提供するGoogle Colaboratoryからでも利用することが可能です。

【今後への期待】

本研究で開発された画像を使った機械学習システムは、化学プラントでの反応モニタリングやロボット合成における分析手段など、迅速に多くのデータを絶え間なく分析する必要があるシーンでの応用が期待されます。また、初心者が熟練研究者の経験と勘を素早く修得するための補助的な役割も担うと考えられます。さらに技術が進めば、目の不自由な人が研究を行う際の目視観察ツールとして活躍するかもしれません。この技術は、決して研究者の仕事を奪うものではなく、これまで経験と勘の修得のために膨大な時間を費やしてきた研究の一部を迅速化し、より良い研究成果を出すための一助となることが期待されています。

【謝辞】

本研究は文部科学省・日本学術振興会科学研究費助成事業「特別推進研究」(22H04914)、「基盤研究(B)」(22H02058)、「挑戦的研究(萌芽)」(20K21214)、「学術変革領域研究(A)」(20H05962)、「基盤研究(S)」(20H05657)、「若手研究」(21K14597)、「特別研究員奨励費」(21J20973)、JST 創発的研究支援事業(JPMJFR211H)、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム(JPMJSP2119)、公益財団法人旭硝子財団「若手継続グラント」、文部科学省世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)の支援のもとで行われたものです。

論文情報

論文名 Machine Learning-Based Analysis of Molar and Enantiomeric Ratios and Reaction Yields Using Images of Solid Mixtures (固体混合物の画像を用いた機械学習によるモル比・エナンチオマー比及び反応収率の解析)

著者名 井手雄紀¹、白倉逸人²、佐野太一²、Murugavel Muthuchamy¹、稲葉佑哉²、Hu Sheng¹、瀧川一学^{1,3}、猪熊泰英^{1,2}(¹北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)、²北海道大学大学院工学研究院、³京都大学国際高等教育院附属データ科学イノベーション教育研究センター(CIREDS))

雑誌名 Industrial & Engineering Chemistry Research (ACS:アメリカ化学会)

DOI 10.1021/acs.iecr.3c01882

公表日 2023年8月23日(水)(オンライン公開)

お問い合わせ先

北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD)・同大学院工学研究院

教授 猪熊泰英(いのくまやすひで)

T E L 011-706-6556 F A X 011-706-6557 メール inokuma@eng.hokudai.ac.jp

U R L <https://www.eng.hokudai.ac.jp/labo/lor/HP/index.html>

北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD) 特任教授

京都大学国際高等教育院附属データ科学イノベーション教育研究センター(CIREDS) 特定教授

瀧川一学(たきがわいちがく)

T E L 075-753-9698 メール takigawa.ichigaku.8s@kyoto-u.ac.jp

U R L <https://itakigawa.github.io>

北海道大学創成研究機構化学反応創成研究拠点(WPI-ICReDD) 特任助教 井手雄紀(いでゆうき)

T E L 011-706-9693 メール ide.yuki@icredd.hokudai.ac.jp

U R L <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/ide-yuki>

配信元

北海道大学社会共創部広報課(〒060-0808 札幌市北区北8条西5丁目)

T E L 011-706-2610 F A X 011-706-2092 メール jp-press@general.hokudai.ac.jp

【参考図】

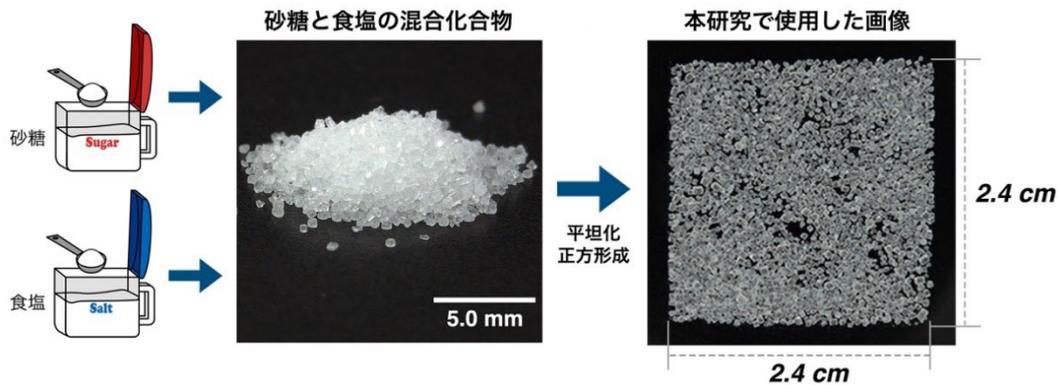


図 1. 本研究で使用した砂糖と塩の混合化合物画像。

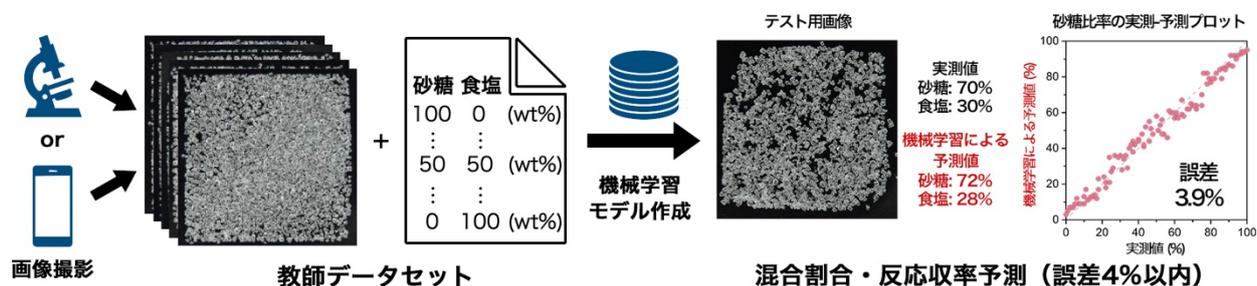


図 2. 本研究で使用した画像を用いた機械学習システムの概要。

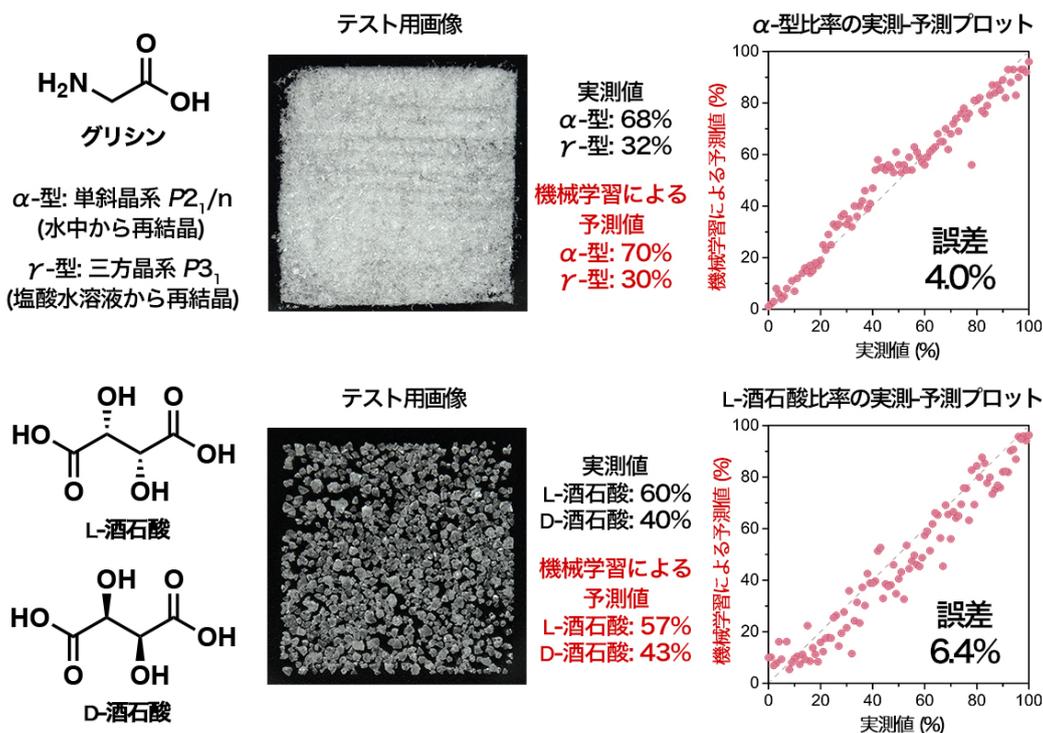


図 3. 結晶多形の異なるグリシン及び鏡像異性体の酒石酸の混合比率予測。

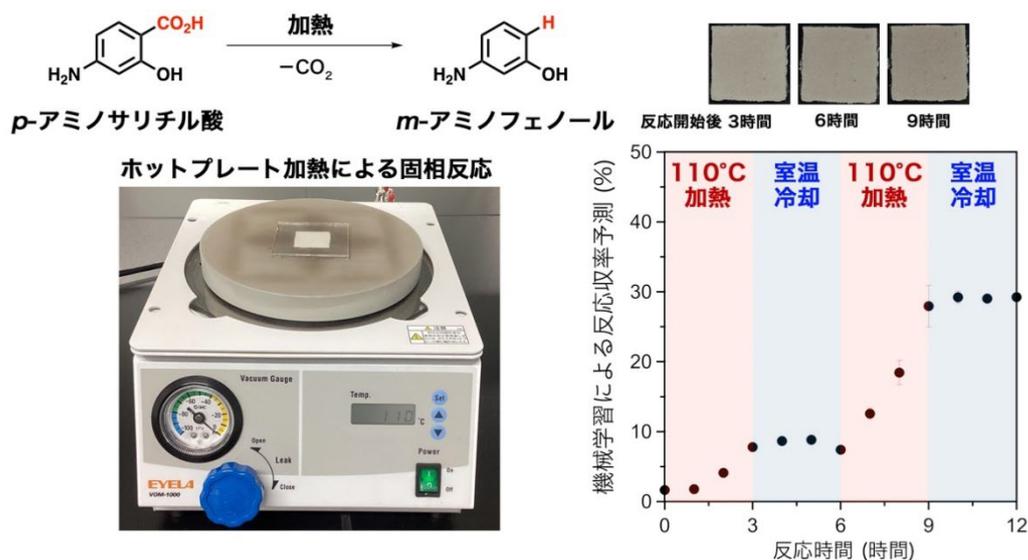


図 4. 加熱による固相反応における画像を用いた機械学習システムを用いた反応収率予測の結果。

【WPI-ICReDD について】

ICReDD(Institute for Chemical Reaction Design and Discovery, アイクレッド)は、文部科学省国際研究拠点形成促進事業費補助金「世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)」に採択され、2018年10月に本学に設置されました。WPIの目的は、高度に国際化された研究環境と世界トップレベルの研究水準の研究を行う「目に見える研究拠点」の形成であり、ICReDDは国内にある17の研究拠点の一つです。

ICReDDでは、拠点長の下、計算科学、情報科学、実験科学の三つの学問分野を融合させることにより、人類が未来を生き抜く上で必要不可欠な「化学反応」を合理的に設計し制御を行います。さらに化学反応の合理的かつ効率的な開発を可能とする学問、「化学反応創成学」という新たな学問分野を確立し、新しい化学反応や材料の創出を目指しています。

