

第14号

2023年12月発行

# カタリスト

北海道大学化学反応創成研究拠点(ICReDD)が発行する、化学反応を楽しく学べるニュースポスター

化学物質を見分ける

「ニューラルネットワーク」



# 化学物質を見分ける 「ニューラルネットワーク」

前号では、新しい分子を発見するために機械学習をどう活用できるかについて説明しましたが、化学において機械学習が役立つ可能性は他にもあります。

化学反応を行う際、まず科学者は反応の生成物を目で確認し、引き続きその生成物の分析に時間をかけるかどうかを判断します。

しかし、見るだけで生成物がうまくできているかどうかを判断するには長い時間をかけて経験を積み重ねる必要がある上に、

たとえ経験豊富な科学者であっても、見間違ふことはあるものです。この課題を解決するため、「人工ニューラルネットワーク」というものを利用し、

固体混合物の画像情報から人の目よりも高速かつ正確に生成物の良し悪しを評価できる機械学習モデルが開発されています。

## 1. 人の目で「見分ける」

砂糖と塩を間違えて、料理が台無しになってしまったことはありませんか？これはわりとよくある間違いですね！私たちの脳は、見た目の特徴から物の違いを識別していますが、砂糖と塩の場合、どちらも白くて小さな結晶という、かなり似た特徴であるため、脳はそれを識別するのに苦労します。同じように、食用キノコと毒キノコも、見た目で見分けるのが難しいものの代表例です。難しいとはいえ、その微妙な違いを見分けられなければ、後から大変なことになる可能性があります。山へキノコ狩りに出かける際には、まずは食べられるか有毒かを見分けるのがかなり重要ですし、また、事前に安全な食用キノコの割合が高いフィールドが分かれば、効率的かつ安全にキノコ狩りに行くことができますね。

食用のクリタケは傘に赤みがあり柄は太く、傘裏は白っぽいのが特徴。

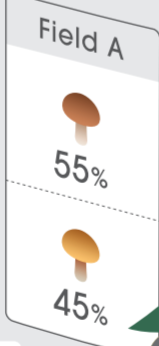
猛毒のニガクリタケの傘は黄みがかり柄は細く、傘裏はオリーブ色なのが特徴。

## 2. コンピュータで「見分ける」

人の脳のニューロン(神経細胞)が電気信号として情報を伝達する方法を模した「人工ニューラルネットワーク」と呼ばれるものを活用することにより、コンピュータは画像を見分けることができます。人工ニューラルネットワークは、スイッチのように機能する人工ニューロンが一面に張り巡らされた層がいくつも重なってできています。最初の層が画像データを受け取ると、各ニューロンは画像の細かな部分を分析し、その特徴がある一定の条件に合わなければ、ニューロンのスイッチは「OFF」のままですが、条件を満たす場合、スイッチは「ON」となり、次の層に情報を送ります。こうして層から層へと信号の送受信プロセスが繰り返され、層が進むほどに分析できる特徴は複雑になっていきます。信号が最終層に到達すると、人工ニューラルネットワークはその信号に基づいて画像を見分けることができるのです。

フィールドAとBどちらの方がクリタケの割合が多い？

Neural Network



画像で割合を解析します！

## 3. 見分けて特定する

人工ニューラルネットワークは、熟練の職人でも見分けるのが難しいような物質の特徴を捉えて、人間よりも正確に見分ける有効な手段として期待されます。化学においては、画像内の固体化学物質を見分けることに応用可能です。最初の層では、「曲線」「尖っている」などの基本的な形状でスイッチを「ON」にし、次の層ではその特徴を持った物質が実際にあるかどうかや、その特徴がどの部分に現れているかなどの条件を設定し、多くの既存データで学習させることで、より細かな分析ができるようになります。すると人の目では見分けるのが難しい色、形、サイズの微細な違いを識別し、化学物質の特徴を捉えてそれらを特定することが可能になります。

## 4. 固体混合物を評価する

このように、画像データから生成物を見分けられる人工ニューラルネットワークですが、さらには画像中に現れる回数情報をもとに、混合物の割合を判定することもできます。ICReDDの研究者たちは、固体混合物の画像を分析できる人工ニューラルネットワークを使用したモデルを作成し、そのモデルが、砂糖と塩が混ざった画像からそれぞれの割合を特定することに成功しました！その精度は、研究チームの中で最も成績良く見分けることのできた研究者の目よりも約2倍高い結果でした。同じモデルはさらに、4つの化学物質の混合物を分析する能力や、固体反応における生成物の進行を監視する能力をも示しました。この技術は、実験室でのより迅速で正確な生成物の確認を可能にし、化学工場で行われる反応を効率的に監視するために産業でも活用できる可能性があります。

**CHALLENGE!**  
カタリストを読んで  
チャレンジしてみよう！

クイズに  
チャレンジ

フィールドBのクリタケとニガクリタケの割合は？

- A 70% 30%
- B 65% 35%
- C 60% 40%
- D 55% 45%

クイズの答えはInstagramのハイライトで公開しています。ぜひチャレンジしてみてください。 #ReactWithUs  
**@ICReDDconnect**



ICREDDCONNECT

## ◎新たに着任した研究者



**パティ・ナレンドラ・ナート**  
研究テーマ  
有機合成、  
ポルフィリン化学



**カウアー・ナヴプリート**  
研究テーマ  
不斉触媒



**フェルナンデス・ヴィトール**  
研究テーマ  
有機触媒、不斉触媒



**ゴーライ・サガール**  
研究テーマ  
計算化学、高分子



**沈 永杰**  
研究テーマ  
触媒計算化学、触媒分解

## ◎代表的な論文 (2023年9月から2023年11月まで)



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～  
(井手、フ・シェン、瀧川、猪熊)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9856>



計算主導による新反応開発の実例  
(林、前田、美多)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/10029>

世界最大サイズの固体内回転型運動を示す分子を開発 ～かさ高いお椀型分子で包み込む手法により、従来の結晶性ローター型分子の制限を克服～

(伊藤、ジン)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/9935>



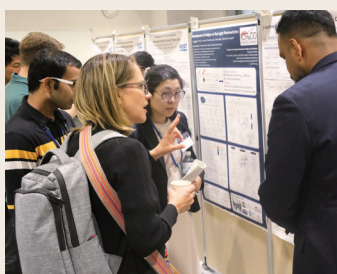
機械学習により有機化学の論文からの化学合成反応プロセスの詳細な手順を自動抽出するための基盤を開発  
(秋山、長田、吉岡)

<https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/research/10123>



## ◎シンポジウム

- ・第6回 ICReDD国際シンポジウム & 第3回 鈴木章賞授賞式
- ・ListサステナブルDX触媒連携研究プラットフォーム キックオフシンポジウム
- ・第12回 世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)サイエンスシンポジウム



第6回 ICReDD国際シンポジウム



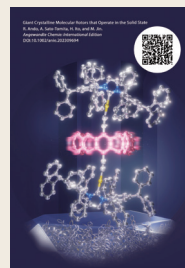
ListサステナブルDX触媒連携研究プラットフォーム  
キックオフシンポジウム

## ◎アウトリーチ

- ・マンスリーニュースポストカード
- ・クォーターリーニュースポスター カタリスト第13号

## ◎受賞

- ・2024年 Skolnik 賞(ヴァーネック)



マンスリーニュース  
ポストカード



カタリスト第13号

## 研究者紹介

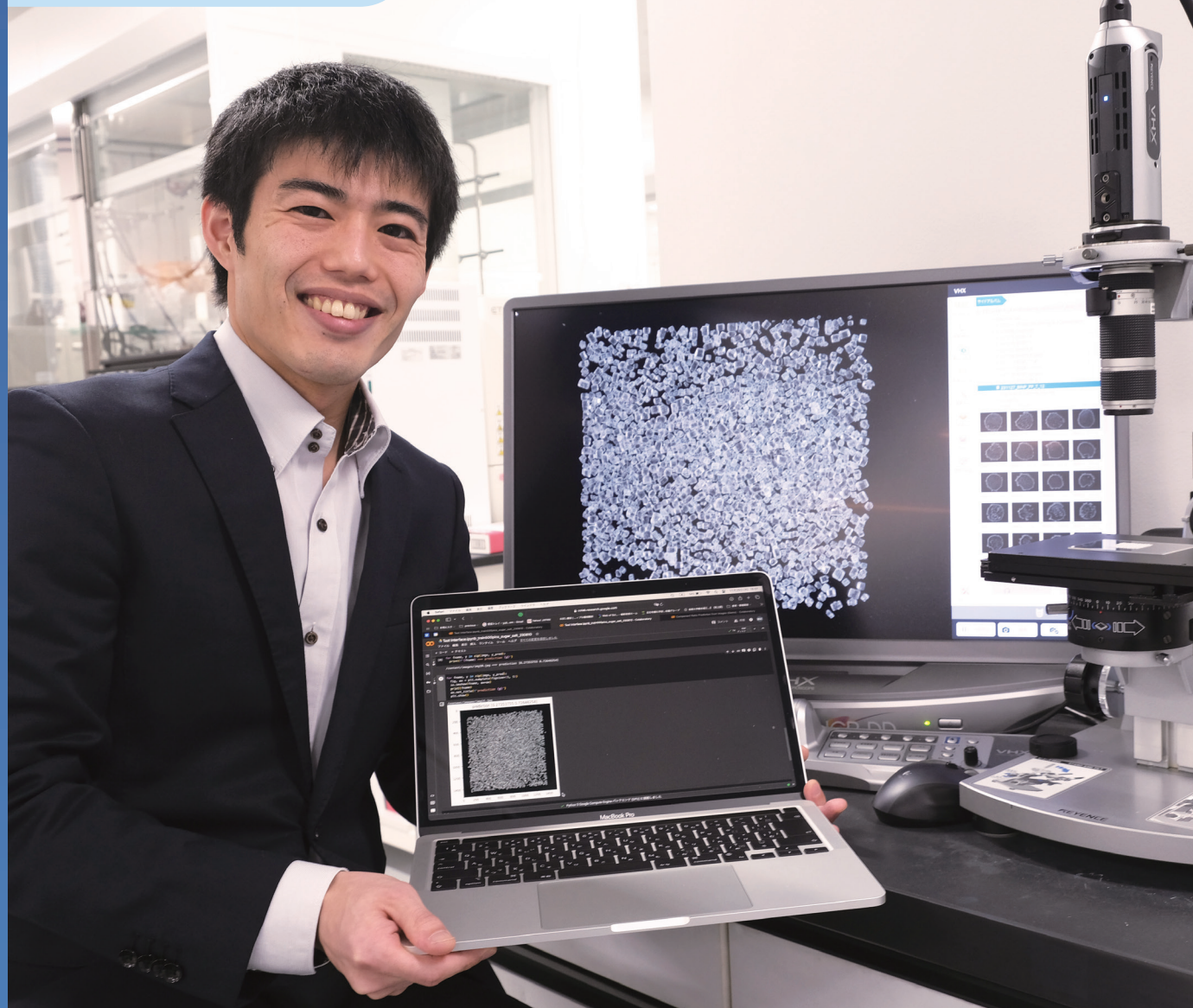
vol.14

## 井手 雄紀

Yuki Ide

## 略歴

ICReDD 特任助教。2018年に島根大学大学院総合理工学研究科にて博士号を取得。2018年京都大学化学研究所 特定研究員を経て2020年4月より現職。



井手特任助教は化学研究における機械学習システムの活用、更に社会実装を目指しています。  
特に、砂糖と塩のような固体混合物の混合比を  
瞬時に解析可能な機械学習システムの構築に関する研究をしています。

### 代表的な論文

Ind. Eng. Chem. Res. 2023, 62, 13790-13798;  
Chem. Sci. 2022, 13, 9848-9854;  
Dalton Trans. 2017, 46, 242-249



## ICReDDについて

新しい化学反応の開発は、人類の繁栄や環境問題と密接に関わっています。その代表的な例は、2010年にノーベル化学賞を受賞したクロスカップリング反応です。この反応は医薬品の約20%、液晶や有機EL材料のほぼ全ての生産に利用されており、年間約60兆円規模の産業に関わっています。これは、新しい化学反応の開発が社会にいかにか大きな影響をもたらすかを示すわかりやすい例です。北海道大学に設置された化学反応創成研究拠点(ICReDD)は、その名の通り化学反応開発を専門とする、WPIの拠点です。化学反応を自在に設計することを目標に、異なる分野の研究者がそれぞれの強みを活かし、協力し合いながら分野融合型の研究を行っていることが大きな特徴の1つです。化学反応の自在設計には、あらゆる段階における横断的な異分野連携が必要となりますが、この新たな融合研究を推進するために誕生したのがICReDDです。化学反応という自然界の基本的なプロセスを研究するためには、量子化学計算、情報技術、最新の実験技術、先端材料の開発など分野ごとに分かれて研究するのではなく、真に融合された新たな研究技術が必要不可欠なのです。

11月、ICReDDは中高生を中心とした一般向けに、第12回世界トップレベル研究拠点プログラム(WPI)サイエンスシンポジウムを開催しました。(上)3名の研究者に情報科学を使った融合研究の取り組みについて講演をいただいた後、パネルディスカッションが行われました。(下)WPIの全18研究拠点によるブース展示会にてVR体験コーナーを含め、様々な形でWPIの研究が紹介されました。

## カタリストとは

「カタリスト」とは触媒のことです。化学で使用される触媒とは、反応をより速く起こさせるために使われます(例:分子を結合させる、反応の障壁を減らす、分子を活性化させる、など)。このポスターを通して、読者の方が日常に無数に存在する化学反応と私たちの生活を結び付け、化学反応や化学といったものが私たちの世界と実際にはどのように関わっているのかを、新しい視点で気づくためのお手伝いができればと考えています。そして、「カタリスト」で私たちのことをもっと知ってもらい、読者の皆さんと私たちの間に新たな関係(化学反応)を築ききっかけ(触媒)を提供できればと思っています。#ReactWithUs

## React With Us!

最新情報を入手するには、  
ICReDDのSNSをフォローしてください。  
@ICReDDconnect



## カタリスト 第14号 2023年12月発行

発行所  
北海道大学 化学反応創成研究拠点 (WPI-ICReDD/アイクレッド)  
〒001-0021 北海道札幌市北区北21条西10丁目

☎ 011-706-9646 (広報担当)  
✉ public\_relations@icredd.hokudai.ac.jp  
WEB <https://www.icredd.hokudai.ac.jp/ja/>

