

画像を用いた機械学習による結晶性化合物の混合比予測

(北大院工¹・北大工²・北大 WPI-ICReDD³・理研 AIP⁴) ○白倉 逸人¹・佐野太一²・井手 雄紀³・Sheng Hu³・瀧川 一学^{3,4}・猪熊 泰英^{1,3}

Predicting the Mixing Ratios of Crystalline Compounds using Image-based Machine Learning (¹Grad. Sch. Eng, Hokkaido Univ., ²Fac. Eng., Hokkaido Univ., ³WPI-ICReDD, Hokkaido Univ., ⁴AIP, RIKEN) ○Hayato Shirakura,¹ Taichi Sano,² Yuki Ide,³ Sheng Hu,³ Ichigaku Takigawa,^{3,4} Yasuhide Inokuma^{1,3}

Visual observation plays an important role as instantaneous and non-destructive preliminary analysis, although reproducibility is low and difficult to perform objectively and continuously. In this research, we constructed an image-based mixing ratio prediction system applicable for crystalline solid mixtures using machine learning (ML). Commercially available sucrose and NaCl were used as a pilot case to predict the mixing ratio. When ML model was made with 300 images of mixture samples (total 200 mg each) having different mixing ratio, a ML-based prediction showed high accuracy of MAE = 0.039, $R^2 = 0.97$ (**Fig.1a**). In a similar fashion, prediction systems for crystal polymorphism ratio of glycine (**Fig.1b**), enantiomeric ratio (*er*) of D-/L-tartaric acids, and four-component mixtures were also established with reasonable MAE and R^2 .

Keywords: Machine Learning; Mixing Ratio Prediction; Crystal Polymorph; Enantiomer Ratio; Sugar and Salt

目視観察は非破壊で瞬時に様々な情報を得ることができるため、予備的な分析手法として研究現場では頻繁に使われる。一方で、その精度は観測者の経験と勘に強く依存するため再現性が低く、大量のサンプルを一定精度で解析することは困難であった。本研究では、熟練研究者による目視観察の経験と勘を非経験者にも共有可能なデータとするため、固体混合物の画像を記述子とする機械学習によって混合比率を予測するシステムを構築した。

有機・無機化合物の混合系の例として、市販の砂糖・食塩を用いた混合比予測診断に取り組み、画像撮影条件や訓練画像枚数の最適化を行った。混合比の異なる混合試料を合計 200 mg となるように秤量し、正方形状に揃えて画像撮影を行った。秤量時に記録した混合比と併せて訓練画像データセットを作成した。訓練画像枚数が 300 枚の際に平均絶対誤差(MAE) = 0.039, $R^2 = 0.97$ と高い精度を有する混合比診断システムの構築を達成した (**Fig. 1a**)。形状や晶系が異なる結晶性化合物として知られる α -/ γ -グリシンに対して同様の手法にて結晶多形比予測を行った結果、MAE = 0.040, $R^2 = 0.96$ と高い診断精度を示すことがわかった (**Fig. 1b**)。キラル化合物である D-/L-酒石酸混合物のエナンチオマー比(*er*)や 4 成分系混合物の分析に対しても高精度での予測を達成しており、幅広い結晶性化合物に対して適用可能であることがわかった。

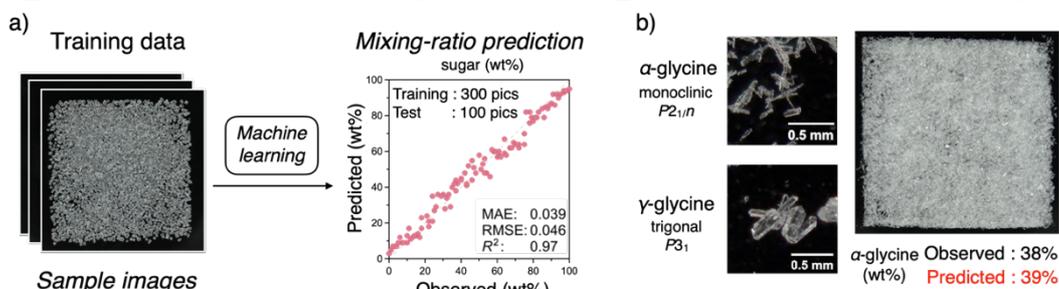


Fig. 1. a) 砂糖と食塩の混合画像を利用した混合比予測 b) α -/ γ -グリシンの結晶多形比