



ご取材のお願い

IRスペクトル画像×機械学習：化学知識なしで化合物を分類 画像データが数値データを超える

【発表のポイント】

- ◆赤外分光スペクトルの画像データを用いた教師なし機械学習で複雑な有機化合物を分類
→ 事前の化学知識なしで複雑な有機化合物のクラスタリングが可能であることを提示
- ◆画像ベースのクラスタリングは、数値データより分子指紋に基づく分類と高い一致
→ 調和ランダム指数（ARI）による評価で、従来の数値データよりも有効
- ◆ノイズに強く前処理も不要な本手法は、大規模スペクトル解析や材料探索への応用が可能
→ 中分子や高分子などのさらに高精度な分類が期待

【概要】

和歌山大学大学院システム工学研究科の吉田健文講師と東京理科大学先進工学部の福健太郎博士（現名古屋大学大学院理学研究科 助教）の共同研究グループは、事前の化学知識を用いずに、赤外分光（IR）スペクトル画像を高次元ベクトル化し、教師なし機械学習によって有機化合物の分類を試みた。階層的クラスタリングの結果、画像ベースのクラスタリングは、数値データより分子指紋に基づく分類と高い一致した。本手法は従来の方法を補完し、大規模データの材料探索やスペクトル解析に有用である可能性が示された。

本研究成果は、2025年3月19日付け（現地時間）アメリカ化学会 *Journal of Chemical Information and Modeling* 誌にオンライン掲載され、Supplementary Coverに採用されました。

【論文情報】

雑誌名： *Journal of Chemical Information and Modeling*

題名： Unsupervised Machine Learning-Based Image Recognition of Raw Infrared Spectra: Toward Chemist-like Chemical Structural Classification and Beyond Numerical Data

著者名： Kentarou Fuku and Takefumi Yoshida*

DOI: 10.1021/acs.jcim.4c01644

本件についてのお問い合わせ

国立大学法人和歌山大学

担当： 企画課 広報係

〒640-8510 和歌山市栄谷930

電話： 073-457-7010

メール： koho@ml.wakayama-u.ac.jp