

Academic Program [Oral A] | 02. Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, and Computational Chemistry :
Oral A

📅 Fri. Mar 28, 2025 9:00 AM - 9:50 AM JST | Fri. Mar 28, 2025 12:00 AM - 12:50 AM UTC 🏠

[C]C302(C302, Bldg. 2, Area 2 [3F])

[[C]C302-3am1] 02. Theoretical Chemistry, Chemoinformatics, and Computational Chemistry

Chair: Tatsuya Ishiyama, Hiroyuki Nakashima

🇯🇵 Japanese

9:00 AM - 9:10 AM JST | 12:00 AM - 12:10 AM UTC

[[C]C302-3am1-01]

Prediction of optical properties and optimization of manufacturing conditions for glass-ceramics products with machine learning

○Makoto Takeuchi¹, Yusuke Hokii², Shigenori Akiyama², Takuya Sato², Hiromasa Kaneko¹ (1. Meiji University, 2. GC Corporation, R&D Dept.)

🇯🇵 Japanese

9:10 AM - 9:20 AM JST | 12:10 AM - 12:20 AM UTC

[[C]C302-3am1-02]

Construction of co-crystal prediction model using machine learning and design of cofomer by the model

○Manato Takeuchi¹, Hiromasa Kaneko¹ (1. Meiji Univ)

🇯🇵 Japanese

9:20 AM - 9:30 AM JST | 12:20 AM - 12:30 AM UTC

[[C]C302-3am1-03]

Construction and Advance of Performance Prediction Models for Organic Cathode Active Materials of Lithium-Ion Battery

○Rika Yamamoto¹, Yasuhiko Igarashi², Shuntaro Miyakawa³, Taisei Sakata³, Shino Yoshizaki³, Takaya Saito³, Hiroaki Imai¹, Yuya Oaki¹ (1. Fac. of Sci and Tech., Keio Univ., 2. Grad. Sch. of Sys. and Info. Eng., Tsukuba, 3. SoftBank Corp.)

🇯🇵 Japanese

9:30 AM - 9:40 AM JST | 12:30 AM - 12:40 AM UTC

[[C]C302-3am1-04]

Accurate Prediction of Assembled Structures of Organic Semiconductors Using Machine Learning and Molecular Simulation

○Takuya Seki¹, Yudai Shinozaki¹, Shunsuke Sato¹, Ryosuke Ito¹, Jun Takeya^{2,3,4}, Toshihiro Okamoto^{4,5}, Go Watanabe^{1,4,6,7} (1. Grad. Sch. of Sci., KITASATO Univ., 2. Grad. Sch. of Front. Sci., Univ. of Tokyo, 3. NIMS, 4. JST CREST, 5. Sch. of Mater. and Chem. Tech., Science Tokyo, 6. Sch. of Front. Eng., KITASATO Univ., 7. KISTEC)

🇯🇵 Japanese

9:40 AM - 9:50 AM JST | 12:40 AM - 12:50 AM UTC

[[C]C302-3am1-05]

Design of extraction solvents with high gold extraction capacity and low water solubility useful for gold separation and recovery using machine learning

○Takuto Tsunemi¹, Tatsuya Oshima², Hiromasa Kaneko¹ (1. Meiji University, 2. The Univ. of Miyazaki)

機械学習によるガラスセラミックス製品の光学特性予測および製造条件の最適化

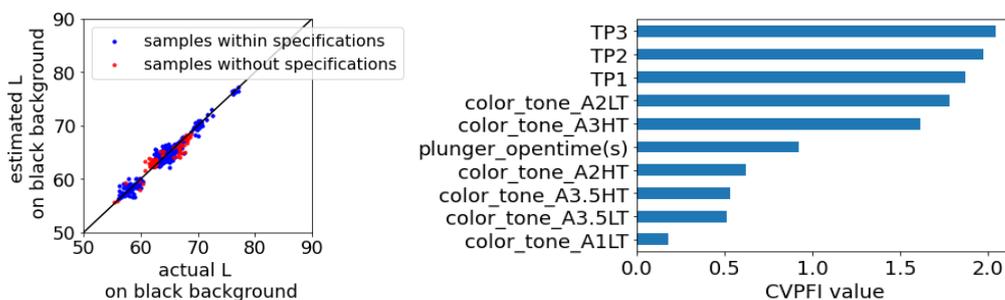
(明大理工¹・株式会社ジーシー²) ○竹内 誠¹・保木井 悠介²・秋山 茂範²・佐藤 拓也²・金子弘昌¹

Prediction of optical properties and optimization of manufacturing conditions for glass-ceramics products with machine learning (¹*School of Science and Technology, Meiji University*, ²*GC Corporation*) ○Makoto Takeuchi¹, Yusuke Hokii², Shigenori Akiyama², Takuya Sato², Hiromasa Kaneko¹

The optical properties of dental glass ceramics depend on the crystallization temperatures during manufacturing process. Traditionally, these temperatures were determined empirically, leading to product losses. In this study, machine learning was used to model the relationship between manufacturing conditions and optical properties, and optimal manufacturing conditions were designed through inverse analysis. Products manufactured under these conditions demonstrated excellent quality.

Keywords : glass ceramics ; manufacturing condition ; optical properties ; machine learning

ガラスセラミックスは審美性に優れた材料であり、ガラスインゴットに対して所定の熱処理を施すことにより結晶を成長させて製造している。製品の光学特性は製造過程における結晶化温度に依存するため、ガラスインゴットを適切な温度条件下で結晶成長させる必要がある。しかし、従来の製造プロセスでは目標とする光学特性を得るための結晶化温度の設定が経験や試行錯誤によることが多く、製造の効率化を図るうえでボトルネックとなっていた。本研究ではガラスセラミックスの製造条件と、光学特性の指標のひとつとして測色値との間での機械学習によるモデル化およびモデルの逆解析によるガラスセラミックスの色調の製造条件の最適化を目的とした。製造条件を説明変数とし、測色値として CIE 色座標の黒背景と白背景での L*a*b*値を目的変数とした。トレーニングデータによるモデル構築とテストデータによる検証を繰り返す交差二乗検証法によりモデルの予測精度を検証し、モデルごとに説明変数間の相関関係を考慮して安定的に変数重要度を計算できる cross-validated permutation feature importance (CVPFI) により解釈した。下図は、黒背景の L*値の実測値と予測値のプロットと、上位 10 変数の CVPFI 値である。サンプルが対角線付近に固まっており精度良く予測できたこと、およびガラスインゴット結晶化に関する変数である TP 1、TP 2、TP 3 の 3 変数が光学特性に与える最も大きな要因であることを確認した。さらに、これらの 3 変数を仮想的に変更してモデルの逆解析を行うことで、色調の目標値に達する製造条件の候補を提案した。



機械学習を用いた共結晶予測モデルの構築およびモデルによる共晶剤の設計

(明大理工¹) ○竹内 真翔¹・金子 弘昌¹

Construction of co-crystal prediction model using machine learning and design of cofomer by the model (¹*School of Science and Technology, Meiji University*) ○Manato Takeuchi,¹ Hiromasa Kaneko,¹

Although co-crystallization of active pharmaceutical ingredients (APIs) in combination with cofomer is an effective means of improving API solubility and bioavailability, the design of cofomer is time-consuming and costly. Therefore, in this study, we utilized machine learning to construct a model that predicts co-crystal formation by using molecular descriptors related to intermolecular interactions, which are important in co-crystallization, as the main explanatory variables. Furthermore, by inverse analysis of this model, we developed a method to efficiently design co-crystallizers for arbitrary APIs.

Keywords : machine learning; co-crystal; cofomer; active pharmaceutical ingredient

現在、開発されている多くの医薬品有効成分 (Active Pharmaceutical Ingredient ; API) は溶解性が低く、生体利用率の低下の原因となっている。溶解性を改善し、生体利用率を向上させる手段として、API と共晶剤の共結晶化が有効であるが、API に対する共晶剤の設計には、膨大な時間とコストがかかってしまう。本研究では、任意の API に対して効率的に共晶剤を設計することを目的とし、分子の構造や性質を数値の形式で表現したフィンガープリントおよび共結晶形成に重要である分子間相互作用を表現する記述子から共結晶の形成を予測する機械学習モデルを開発した。

フィンガープリントとして ECFP6 を、分子間相互作用を表現する記述子として COSMO-RS 法¹⁾に基づいて計算される σ -profile およびハンセン溶解度パラメータ (HSP)を用いた。さらに、これらの記述子では表現されない2つの分子の幾何学的相補性に関する記述子(geometric desc.)も用いた。これらの記述子は、単独でも共晶剤のスクリーニング法として有効であることが知られているが、本研究ではこれらを組み合わせ合わせた記述子(combined)も機械学習モデルの説明変数として用いた。下表はそれぞれの記述子を説明変数として用いた際に 10-fold クロスバリデーションで検証したモデルの予測精度の比較結果である。記述子を組み合わせ使用した際に正解率・F 値ともに最も高く、予測精度の高いモデルを構築できることが確認された。構築した予測モデルを逆解析することで、任意の API に対する共晶剤の設計を行った。

	descriptor				
	ECFP6	σ -profile	HSP	geometric desc.	combined
accuracy	0.775	0.737	0.688	0.723	0.778
F1 score	0.770	0.731	0.679	0.717	0.774

- 1) COSMO-RS: a novel and efficient method for the a priori prediction of thermophysical data of liquids. A.Klamt, F.Eckert, *Fluid Phase Equilibria*. **2000**, 172(1), 43-72

機械学習を活用したリチウムイオン二次電池有機正極活物質の性能予測モデルの構築と進化

(慶大理工¹・筑大院シス情²・ソフトバンク³) ○山本 里夏¹・五十嵐 康彦²・宮川 絢太郎³・坂田 大成³・吉崎 志乃³・齊藤 貴也³・今井 宏明¹・緒明 佑哉¹

Construction and Advance of Performance Prediction Models for Organic Cathode Active Materials of Lithium-Ion Battery (¹Fac. of Sci. and Tech., Keio Univ., ²Grad. Sch. of Sys. and Info. Eng., Univ. of Tsukuba, ³SoftBank Corp.) ○Rika Yamamoto¹, Yasuhiko Igarashi², Shuntaro Miyakawa³, Taisei Sakata³, Shino Yoshizaki³, Takaya Saito³, Hiroaki Imai¹, Yuya Oaki¹

Organic energy storage has attracted much interest to save resources and achieve higher energy density. Our group has reported the performance prediction models for organic cathode active materials of lithium-ion battery based on the small data using sparse modeling combined with the chemical insights. In the present work, the improved prediction models for the performances, such as capacity, potential, and energy density, were constructed with the addition of the training data. The validity of the descriptors and accuracy of the predictors were studied by data-scientific manner.

Keywords : materials informatics; lithium-ion battery; organic cathode active materials; machine learning; sparse modeling

蓄電池の資源リスクフリー化と高性能化の両立のためには、有機正極の高エネルギー密度化が必要である。当研究室では、小規模データに対するマテリアルズインフォマティクスとして、機械学習と化学的考察を融合することで、リチウムイオン二次電池有機正極活物質の性能予測モデルの作成を行ってきた¹⁾。しかし、第1世代のモデルAでは、訓練データは38化合物であり予測精度が十分ではない。また、反応部位が既知の分子のみに適用される記述子を含んでいるため、新規骨格の探索が困難である。本研究では、訓練データを60化合物に増やし、12個の説明変数を準備し、新たに容量(C)、電位(P)、エネルギー密度(E)について第2世代のモデルBを作成した(Fig. 1)。このとき、Exhaustive search with linear regression (ES-LiR)とBayesian model averaging(ES-BMA)を用いることで記述子を抽出した。構築したモデルを用いて直近10年程度で報告された12個の化合物の性能を新たなテストデータとして使い、予測精度の検証を行った。また、訓練データを増やしたことによる予測精度の向上について検証した。

- 1) K. Sakano, Y. Igarashi, Y. Oaki *et al.* *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 2, 2074–2082

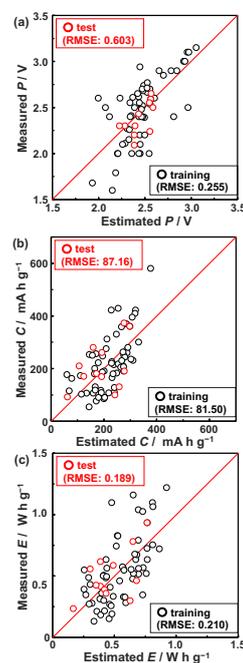


Fig. 1 電位(a), 容量(b), エネルギー密度(c)予測モデルの予測値と実測値の関係。

機械学習と分子シミュレーションを用いた有機半導体の精緻な集合体構造予測

(北里大院理¹・東大院新領域²・物材機構³・JST CREST⁴・科学大物質理工⁵・北里大未来工⁶・神奈川県産総研⁷) ○關 拓和¹・篠崎 雄大¹・佐藤 俊輔¹・伊藤 良将¹・竹谷 純一^{2,3,4}・岡本 敏宏^{4,5}・渡辺 豪^{1,4,6,7}

Accurate Prediction of Assembled Structures of Organic Semiconductors Using Machine Learning and Molecular Simulation (¹Graduate School of Science, Kitasato University, ²Graduate School of Frontier Sciences, University of Tokyo, ³NIMS, ⁴CREST, JST, ⁵School of Materials and Chemical Technology, Institute of Science Tokyo ⁶School of Frontier Engineering, ⁷KISTEC) ○Takuya Seki,¹ Yudai Shinozaki,¹ Shunsuke Sato,¹ Ryosuke Ito,¹ Jun Takeya,^{2,3,4} Toshihiro Okamoto,^{4,5} Go Watanabe^{1,4,6,7}

The performance of organic semiconductors (OSCs) is significantly influenced by their crystal structures. Traditionally, molecular design has depended on the expertise and intuition of the researchers and does not make effectively use of computational methods. In this study, we introduce a machine learning model that can predict whether a molecule will form a herringbone (HB) packing structure. Furthermore, the combination of molecular simulations with the machine learning model has the potential to predict the crystal structure of OSCs. Our model, trained on the crystal structures of 210 previously reported OSC molecules and utilizing MACCS keys molecular descriptor with the LightGBM algorithm, achieved an accuracy of 91.0%. Analysis of SHAP values revealed key substructures that contribute to the formation of HB packing. By combining of this machine learning model with a novel crystal structure prediction method based on molecular simulations, it was possible to determine the crystal structures of a molecule.

Keywords : Crystal Structure Prediction; Machine Learning; Molecular Dynamics; Organic Semiconductor

有機半導体の高機能化には、結晶構造を考慮した分子設計が重要である。しかし現状、分子設計は実験研究者の知識や経験則に依存しており、計算科学的手法の効果的な活用が課題となっている。そこで本研究では、機械学習による有機半導体の π 系骨格の二次元パッキング構造の予測と分子シミュレーションを組み合わせた結晶構造予測¹⁾を目指した。既報の有機半導体 210 分子の結晶構造から、分子構造と二次元パッキング構造のライブラリを作成して、ヘリングボーン (HB) 様式の充填構造の予測モデルを構築した。複数のモデルを検証した結果、分子記述子 MACCS keys と機械学習モデル LightGBM を用いることで、正解率 91.0% で HB パッキングを予測できた。構築したモデルについて SHAP 値を算出することで、HB パッキング発現に寄与する部分構造を同定した。また、我々が提案した分子力学計算と分子動力学計算の組み合わせによる結晶構造予測手法²⁾と構築した機械学習モデルを用いることで結晶構造を一意に決定できる可能性を見出したが、その詳細は当日報告する。

- 1) T. Seki, G. Watanabe *et al.*, *ChemRxiv* (2024).
- 2) 渡辺 豪 他, 特開 2024-004296, 2022-0628.

機械学習を用いた金の分離回収に有用な高い金抽出能力と低い水溶解度を持つ抽出溶媒の設計

(明治大理工¹・宮崎大工²) ○常見 拓大¹・大島 達也²・金子 弘昌¹

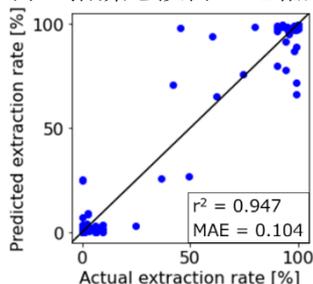
Design of extraction solvents with high gold extractability and low water solubility useful for gold separation and recovery by machine learning (¹*School of Science and Technology, Meiji University*, ²*Faculty of Engineering, University of Miyazaki*) ○Takuto Tsunemi,¹ Tatsuya Oshima,² Hiromasa Kaneko¹

Dibutyl carbitol (DBC) shows high extractability for gold (Au(III)) and has been used industrially as the extracting solvent. However, water solubility of DBC is 3 g/dm³, which is disadvantageous in leak of the solvent into the aqueous phase.¹⁾ Therefore, it is necessary to design extracting solvents with high Au(III) extractability and less solubility in water. The authors constructed models $y=f(x)$ to predict the extraction and water solubility y from the molecular descriptor x of the chemical structure using the Au(III) extractability and water solubility of various solvents. Inverse analysis of these models was performed to design solvents suitable for Au(III) extraction.

Keywords : Machine Learning; Materials Informatics; Solvent Extraction; Organic Solvent; Gold

電気電子廃棄物は金の再利用のための資源として注目されており、より効率的な金の回収方法が模索されている。塩化法で浸出した金 (Au(III)) の溶媒抽出では従来、抽出能力の高いジブチルカルビトール (DBC) が用いられてきたが、水への溶解度が 3 g/dm³ であり操作の度に目減りしてしまうという欠点があった。¹⁾ そこで本研究は高い金抽出能力と低い水溶解度を併せ持った溶媒を開発することを目的とした。

様々な化合物の金抽出率、水溶解度のデータを用いて化学構造の分子記述子 x から抽出率・水溶解度 y を予測するモデル $y=f(x)$ をそれぞれ構築した。モデルの検証にはトレーニングデータとテストデータの分割をサンプルの数だけ繰り返すダブルクロスバリデーションを用いた。下の散布図は構築した抽出率予測モデルの実測値 vs. 予測値プロットであり、 r^2 が 0.9 を超えておりサンプルが対角線付近に固まっていることから高い予測精度を示している。構築したモデルの逆解析によって高い抽出能力と低い水溶解度を併せ持つ溶媒を設計した結果については当日報告する。



1) Au(III) extraction using ketone compounds with physical properties superior to current commercial extractants. T. Oshima, K. Miyake, *AIChE J.* **2021**, *67*, 1-2.