

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2021 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

佐藤 英祐

岡山大学 学術研究院自然科学学域
助教

機械学習を利用した有機電解合成反応の効率的最適化

§ 1. 研究成果の概要

陽極酸化を触媒的に用いる有機電解合成反応の条件最適化について機械学習を活用する試みに取り組んでいる。取り組む化学反応としては、Claisen 転位反応と呼ばれる[3,3]シグマトロピー転位を経る炭素-炭素結合形成反応と、carbon-Ferrier 転位反応と呼ばれるグリカル誘導体に対する炭素官能基化の二つを選択した。

Claisen 転位反応においては、目的化合物の過剰酸化を抑制するためにフロー電解装置を用いた機械学習による最適化を目指した。その際、化学反応の収率に関わる数種類のパラメーターが明らかになった。その一方で、機械学習に用いるためには安定したデータ収集が必要であるが、データの再現性に問題が生じてしまっている。現在、反応条件や装置に関する条件検討を行うことで再現性が担保されたデータ収集を目指している。

陽極酸化を駆動力とする carbon-Ferrier 転位反応については、Claisen 転位と異なり再現性が担保された安定した収率にて目的化合物を得ることができた。特に、フロー合成装置を活用した合成反応に対してのガウス過程回帰の利用の可否を判断すべく、「電流値」と「流速」という二つの数字パラメーターを変化させて、それに対する「目的化合物の収率」の変化を観測し、それらの情報を入力データとしたガウス過程回帰モデルを作成した。本研究では、「収率」だけでなく「生産性」にも着目し、「生産性」を目的変数とするガウス過程回帰モデルも作成した。その結果、回帰モデル作成を行うことができたが、その妥当性評価を十分に行うことができていない。今後は、それらの妥当性を評価すべく、データ処理や実験的なアプローチの双方から取り組む。