

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2021 年度採択研究代表者

2022 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

研究成果の概要

有機電解合成法における、機械学習の活用について引き続き取り組んでいる。本年度は以下の二つの化学反応について主に取り組んだ。

まず、陽極酸化を触媒的に活用する carbon-Ferrier 転位反応の機械学習による条件探索を行なった。昨年度までに、通常のバッチ反応装置を利用することで、グルカール類の carbon-Ferrier 転位反応が、触媒的な陽極酸化によって進行することを見出していた。本反応は、僅かな通電だけを駆動力としていたため、我々が有するマイクロフロー反応装置への適用が可能であると考えた。その際に、通常のバッチ反応装置を用いた手法と比較して、フロー系では最適化すべき数値パラメーターが増加するという問題を機械学習によって解決した。すなわち、流速と電流値という2つの数値パラメーターを入力とし、これらの入力に対する収率や単位時間あたりの生産性といった目的変数に関するデータを実験的に収集し、これらを用いた反応性予測のためのガウス過程回帰モデルを構築した。これにより、数少ない実験量の結果だけから良い実験結果を得られる実験条件を合理的に導くことに成功した。

また、これまでに構築したガウス過程回帰モデルの中には、化合物情報が含まれていないため、異なる出発原料を用いた際には、実験結果の再収集が必要だった。年度後半では、出発原料の情報をモデル構築の入力パラメーターの一つとすることで、さまざまな官能基を有するような化合物群の反応性を予測できるような機械学習モデルの構築にも取り組んだ。

【代表的な原著論文情報】

1) Eisuke Sato, Gaku Tachiwaki, Mayu Fujii, Koichi Mitsudo, Takashi Washio, Shinobu Takizawa, Seiji Suga, *Org. Process Res. Dev.* **2023**, *in press*.