

合成にAI活用省エネ化

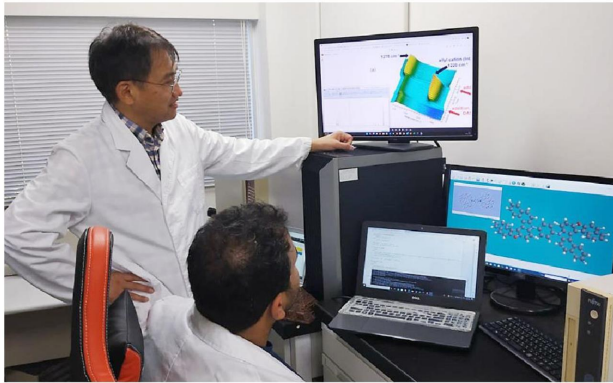
ベイズ最適化 収率高い条件探索

有機硫黄化合物

【大阪】旭化学工業（大阪市淀川区）は、AI（人工知能）を活用して有機硫黄化合物の合成にかかる消費エネルギーを抑制、カーボンニュートラルに貢献する。同社は大阪大学産業科学研究所の滝澤准教授と、機械学習の一つで少ないデータから関数を予測するベイズ最適化

旭化学工業

という手法を用い、収率の高い反応条件の探索に取り組んできた。今後、これまでの反応濃度、等量比などのパラメーターに加えて、エネルギー効率を考慮した“制限付き”ベイズ最適化も推進。コストや環境に配慮した反応条件を導き出したいと考えた。



研究に勤しむ阪大の滝澤准教授（左）

収率に大きく影響を与えるパラメーターを設定し、技術者や研究者の経

験に基づいた数例の実験データをベースに、複数のアルゴリズムによる条件の算出を試みた。結果、同社が5年かけて決めた従来のもので、収率を20%向上させた条件をわずか数週間で提示できた。同社では、この条件で100kg規模へのスケールアップにも成功しており、商業生産できる体制を整えている。

今後は別の有機硫黄化合物を対象に、収率と消費エネルギー低減を両立した最適合成条件探索も計画。既存のパラメーターなどのほか、エネルギー効率も考慮する。すでに技術者らがベースとなる実験データの収集に取りかかっている。また、この新たな探索でも商業ベースでの実用化を視野に入れる。実現のため、ベイズ最適化以外の機械学習を応用し、スケールアップのぶれを補正するプログラムも進められていく予定だ。

有機硫黄化合物を核に、同研究を開始。スケール

挑んだ。

自社製品と受託合成を手がける同社と滝澤准教授は、2021年11月に共

実験試行回数の最少化に

共同研究では、同手法

シ樹脂の硬化剤などに用