

ラジカル重合反応におけるフロー合成プロセスのベイズ最適化

(奈良先端科学技術大学院大学¹・慶應義塾大学²・JSR 株式会社³) ○伊藤 翔¹・高須 聖五¹・及川 駿登¹・原嶋 庸介¹・高山 大鑑¹・Aniruddha Nag¹・脇内 新樹³・菅原 哲徳³・畑中 美穂²・宮尾 知幸¹・松原 崇充¹・大西 裕也³・網代 広治¹・藤井 幹也¹

(¹Nara Institute of Science and Technology, ²Keio University, ³JSR Corporation) ○Sho Ito¹, Shogo Takasuka¹, Shunto Oikawa¹, Yosuke Harashima¹, Tomoaki Takayama¹, Aniruddha Nag¹, Araki Wakiuchi³, Tetsunori Sugawara³, Miho Hatanaka², Tomoyuki Miyao¹, Takamitsu Matsubara¹, Yuya Ohnishi³, Hiroharu Ajiro¹, Mikiya Fujii¹

Optimization of process conditions for materials development relies on the experience and intuition of researchers. Such optimization methods take a great deal of time and cost to discover the desired material. In this study, we used Bayesian optimization to optimize the flow synthesis process conditions that result in a 50:50 copolymer composition ratio. Using Bayesian optimization with effective flow synthesis, the process conditions that resulted in a copolymer composition ratio of 50:50 were found after the sixth round of optimization. Bayesian optimization using flow synthesis effectively found several process conditions that resulted in a copolymer composition ratio of 50:50. It was found that the fusion of flow synthesis and Bayesian optimization facilitates material development.

Keywords : Machine Learning, Materials Informatics, Polymer Science, Flow Synthesis, Bayesian Optimization

材料開発のプロセス条件の最適化は研究者の知識と経験により決定することが多く、所望の特性を有する材料を合成するプロセス条件の決定に物理的、時間的にコストをかけてきた。近年、機械学習等を用いることで、物性予測やプロセス最適化を迅速に行う取り組みが注目を集めている。本研究ではフロー合成によるラジカル共重合反応に着目し、ベイズ最適化によりプロセス条件の最適化をおこなった。最適化目標の条件は、コポリマー組成比を 50:50 とするプロセス条件としたところ、最適化回数 5 回目で目標を達成した。さらに、フロー合成装置の特性を活かして、仕込みモノマー比率や合成反応時間について広範なサンプリングを行うよう拡張したベイズ最適化を実施したところ、目標としたコポリマー組成比が 50:50 になるプロセス条件は複数あることがわかった。以上から、フロー合成とベイズ最適化の融合により、共重合反応において目的のポリマーを迅速に開発可能であり、かつ複数のプロセス条件を見いだせることが判明した。当日はプロセス最適化について詳細を発表する。

