

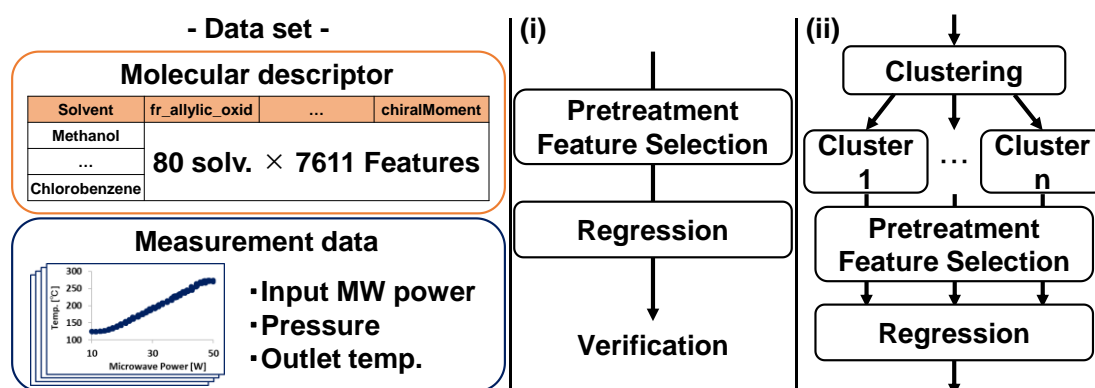
## グリーンフロー化学：機械学習を用いた各種溶媒のマイクロ波フロー出口温度予測

(静岡大院総) ○磯部 海志・佐藤 浩平・鳴海 哲夫・武田 和宏・間瀬 暢之  
 Green Flow Chemistry: Predicting Microwave Flow Outlet Temperature of Various Solvents Using Machine Learning (*Graduate School of Integrated Science and Technology, Shizuoka University*)  
 ○Kaishi Isobe, Kohei Sato, Tetsuo Narumi, Kazuhiro Takeda, Nobuyuki Mase

Microwaves have been applied to the rapid and material-selective heating of reaction systems. However, it is difficult to estimate the reaction temperature with microwave heating because the heating efficiency varies depending on the physical properties and temperature of the target material. In recent years, we have encouraged the development of microwave flow reactions for scale-up. Then, the outlet temperature must be estimated according to the solvent used and the conditions of the equipment. We investigated temperature estimation by machine learning from a data set consisting of microwave irradiation power, back pressure, and outlet temperature, in addition to molecular descriptors of various solvents. In this study, we improved the accuracy of the prediction model by feature selection and built a prediction model for various solvents by clustering based on molecular descriptors.

**Keywords :** *Green Flow Chemistry; Microwave Flow Chemistry; Machine Learning; Outlet Temperature Prediction; Molecular Descriptor*

マイクロ波加熱は迅速かつ物質選択的に反応系を加熱することが可能であり、この応用が進められている。しかし、対象物の物性や温度により加熱効率が変化するため、マイクロ波加熱における反応温度の推算は困難である。我々はスケールアップを指向してマイクロ波加熱を利用するフロー反応の開発を推進しているが、化学反応の重要パラメータである反応温度を、直接設定できない課題がある。これまでに、溶媒と装置条件から出口温度を推算することを目指し、各種溶媒の分子記述子に加えマイクロ波照射電力、背圧、出口温度からなるデータセットから機械学習による温度推算を検討してきた<sup>1)</sup>。今回は、特徴量選択による予測モデルの精度向上や、分子記述子に基づいてクラスタリングした溶媒毎の予測モデルを構築した。



1) 第 101 回日本化学会春季大会 (A19-4am-11)