

プロセスインフォマティクスを用いた化学プロセス設計

Development of Chemical Processes using Process Informatics

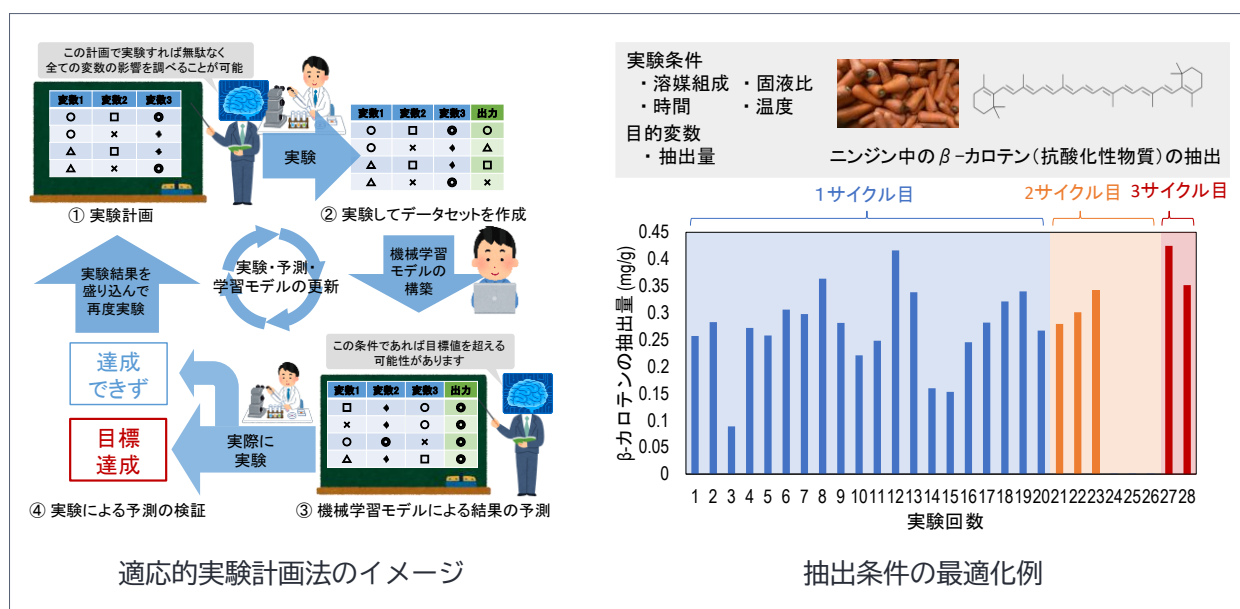
材料技術部 吉田 誠一郎・近藤 永樹・執行 達弘

■研究の背景

近年、AIやシミュレーション技術の発展により、データ駆動型のプロセス設計手法である、プロセスインフォマティクス（PI）技術が注目されています。統計学や機械学習などのPI技術を適用することで、技術者の経験や勘などによらず、複雑なプロセスを迅速かつ効率的に最適化が可能です。PI技術の導入は、リソースが限られている中小企業において有効であると考えられますが、ケーススタディが少なく、その適用範囲は未知な面があります。本研究では、天然物を対象とした化学プロセスへの、PI技術の適用可能性を検証しました。PI技術の一つである「適応的実験計画法」を用いて、北海道産のニンジンに含まれる抗酸化性物質のβ-カロテンを、効率的に抽出可能な混合溶媒の組成と抽出条件の同時最適化を検討しました。

■研究の要点

1. 機械学習モデルの構築に適した初期の実験条件の選定
2. 抽出実験の結果を用いた機械学習モデル構築
3. 機械学習モデルによる抽出条件の予測と最適化



■研究の成果

1. 無数の実験候補から、機械学習モデル構築に適した、初期実験の条件を20組選定しました。
2. 抽出実験の結果を学習データとして、抽出量を予測するための機械学習モデルを構築しました。
3. 予測、実験、学習モデルの更新を繰り返すことで、30回弱の実験数で、効率的にβ-カロテンを抽出でき、かつ溶媒コストを数十%削減可能な条件を見出しました。
4. 他の化学プロセスについても、本技術による最適化が可能であることを確認しました。本技術の中小企業への展開が期待できるため普及につとめます。