

エンジニアは AI とどう向き合うか-2

常木英昭

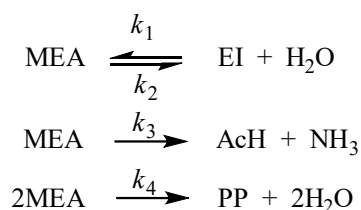
【はじめに】

昨年触媒懇談会ニュースで AI による反応解析・コード生成がかなり進歩したことを述べた。一方触媒プロセス開発に当たっては発想の転換や飛躍が必要なことが起こる。それができないと開発を遮る大きな壁となって立ち塞がることが多い。これは触媒プロセス開発に限らないが、このような課題に対して生成 AI は有効な解を示してくれるのであろうか？それができるようならば経験豊富で発想豊かな技術者を超えることになるかもしれない。私が実際のプロセス開発で経験した事例を 2 つ挙げ、これらの解決にどの程度生成 AI が使えるかについて検討した。なおこの事例については懇談会ニュース No.206(2026/1)で紹介しているので詳細は参照されたい。なお生成 AI としては Gemini3.0 と ChatGPT5.2 を用いた。

【1. 平衡反応での選択性】

事例の詳細についてはNo.206を参照していただくとして、生成 AI に与えた情報を下記に示す。

反応スキーム



Scheme 2.1 Simplified reaction model

反応結果

Table 2.3 Catalyst performance at various MEA concentration and GHSV

MEA concentration [vol%]	GHSV [h ⁻¹]	MEA conversion [mol%]	Selectivity [mol%]		
			EI	AcH	PP
5	3000	71.3	81.1	16.8	2.1
	1500	83.3	66.3	29.6	2.9
	800	87.2	46.9	47.3	5.9
10	3000	68.0	73.7	21.9	4.4
	1500	73.0	62.6	31.1	6.2
20	3000	53.9	66.5	23.7	9.8
	600	81.8	28.1	56.3	15.5

Catalyst composition (except oxygen) :Si₃Cs₁P_{0.58}, Reaction temperature 673 K.

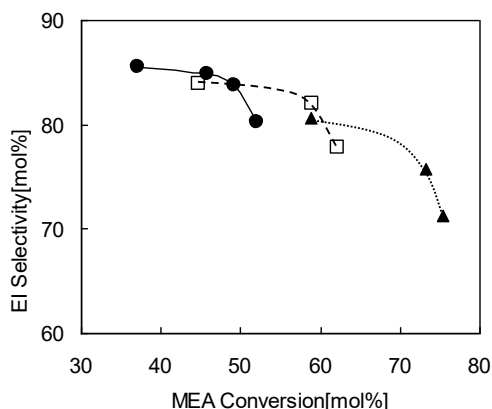


Fig. 2.4 Relationship between MEA conversion and EI selectivity at various temperatures
 MEA concentration 5 vol%, SV 1500-5000 h⁻¹
 ●:653 K, □:673 K, ▲:693K.

この問題は主反応が平衡の制約で足踏みしている間に平衡の制約の無い副反応だけが進行してしまうことになる。これに対して次の問い（赤字）を出した。

「添付のようにモノエタノールアミンからエチレンイミンを製造するプロセスに関しての実験データの解釈について教えてください。添付のように原料濃度とSVを変えた時のデータがあります。濃度を上げていくと同じ転化率での選択率が急に低下するという異常な現象が見られています。この現象をどのように解釈しますか？」

これに対する最初に生成AIが示した解釈は、十分なものではなく、追加の指摘をしたが

『濃度上昇により二分子反応や表面過密が進行し、副反応が促進されるというものであった。』という回答が返ってきたがこの説明では、

・5 vol%条件でも転化率上昇に伴い選択率が急低下する点

・副反応の主体が二分子脱水ではなく脱アンモニア反応である点
 ・温度上昇により選択率低下が始まる転化率が高転化率側にシフトする点を説明することができなかった。

一部の回答では、『EI から AcH への異性化を仮定する』など、化学的に成立しない反応経路が持ち出される場面も見られ問題の本質から外れていた。

そこで、熱力学的制約の可能性を示唆し、平衡の観点から再考を促したところ、ようやく『本反応系が EI 生成において平衡の制約を強く受けていること、ならびに平衡制約を受けない副反応（AcH 生成）が相対的に進行することが指摘された。』

現象 解釈

高濃度での選択率低下 生成物分圧上昇による EI 生成の平衡到達（逆反応の顕在化）。

AcH の圧倒的優位 熱力学的な最安定物であり、平衡の制約をほぼ受けないため。

温度によるシフト 吸熱反応である EI 生成の平衡定数向上と、高い活性化エネルギーの克服。

ようやく問題の根本的な原因に到達できた。かなり誘導しないとこの結論には到達できない。やはりそう簡単に発想を飛躍できるものではないようだ。

【2. 減圧反応】

次は同じく No.206 で紹介した減圧反応についてである。

次の課題として

「生産性を考えると 20-30%の濃度で転化

率を抑えるプロセスが良さそうです。
これを前提に添付のようなプロセスを考えて実験しましたが、沸点の比較的低い EI を捕集するために大きな捕集塔 (充填塔) の上部から MEA を供給すると、MEA がミスト状になってロスし、実質的な MEA の原単位が大幅に増加する問題が起きてこの構造は適用できませんでした。これを解決する方策を提案ください (たくさんある場合は可能性の高いもの 3 つまで)。」

減圧反応におけるミスト問題に対して、生成 AI は『徐冷、デミスター、スクラバー』といった一般的な対策を提案した。しかし、これらはいずれも実験的に十分な効果を示さず、問題の根本解決には至らなかった。これらが十分な効果を示さなかったことを伝えると

『「クエンチ (急冷) 槽」と「吸収塔」の分離、高効率コアレッサ、多段階冷却 (分縮) による「霧」の発生抑制』などを提案してきた。これらの中には当時試していなかった対策もあり、検討に値するかもしれないが、かなりコスト増につながる可能性がある。そこで

「問題の根源はキャリアーガスの存在にあります。キャリアーガスを使わないプロセスは可能ですか？」

と発想の転換となるアイデアを示唆すると

『1. 減圧下での純成分反応プロセス (真空プロセス)』

キャリアーガスを除去する代わりに、系全体を減圧 (真空) 状態で運転する方法です。

- **メカニズム:** 供給原料を 100% MEA 蒸気とし、反応器および後段の回収

系を数 kPa~数十 kPa の減圧下に置きます。

- **メリット:**
 - **ミストの消失:** 非凝縮性ガスが存在しないため、冷却器 (コンデンサ) で「全縮」が可能です。吸収塔や噴霧が不要になり、MEA のロスがほぼゼロになります。
 - **平衡の移動:** 反応物・生成物の分圧が下がるため、100% 濃度であっても「平衡の壁」を回避でき、高い転化率を維持しやすくなります。
- **課題:** 真空ポンプの設置と、系内への空気漏入防止 (EI は引火性・毒性が高いため) の厳格な管理が必要です。

専門家としての推奨: 真空プロセスの検討

ミスト問題と、先に議論した「高濃度での収率悪化 (平衡制約)」の両方を一挙に解決できるのは、**「1. 真空プロセス」**です。キャリアーガスを使わない場合、反応器内の全圧がそのまま MEA および生成物の分圧となります。常圧 (100 kPa) で純 MEA を流すと、Table 2.3 の「20 vol%」のデータよりもさらに過酷な条件 (100 vol%) となり、選択率は大幅に悪化するはずですが。

しかし、系内を 10 kPa 程度まで減圧すれば、実質的な分子密度 (分圧) はキャリアーガスで 10% に希釈したのと同等になり、高い選択率と「ミストのない全凝縮回収」を両立できます。』

初めて減圧法の提案が出てきた。キャリアーガスを使わないというヒントだけで正解

にたどり着いたのは評価できる。普通の技術者ではこの回答を出せるのは限られていると考えられる。原理的な理解に加え、実装上の課題についても言及している。しかし発想の転換となるヒントは必要であった。

「この減圧法が最初の選択肢に入らなかったのはなぜですか？」と尋ねると

『「固定床触媒反応＝常圧～加圧」が“無意識の前提”になりやすい

多くの触媒プロセスでは、
常圧～やや加圧が“標準設計”
になっています。

そのため設計検討の初期段階では、

- 「減圧＝反応が遅くなる」
- 「減圧＝真空設備が高い」
- 「減圧＝スケールアップが難しい」

という一般論が先に立ち、

👉 「減圧は特殊条件」扱いになりがちです。』

人間が経験に引きずられがちなのに対して、AIは学習したことの量に影響を受ける。そのため最初の選択肢は人間と同じく常識的なものになる。全く常識外れの発想の転換をはじめからAIに期待するのは間違いのようである。議論を進めて常識的な線の延長上に解がないことが分かるとAIは常識から外れたことも考慮に入れ、回答にたどり着けるのであろう。

先に示した反応の解析でもAIは常識的な解析から始めており、平衡反応であることを示しているにもかかわらずそれがどのように影響するかには思い至らなかった。

「一般論としてイノベーションは常識外れの発想が元になることが多い。その意味で

は生成AIにいきなりイノベーションの元となる発想を求めるのは無理があるのですね。」

と問いかけると

『はい、その理解は本質的に正しいです。そして、ここまで議論を積み上げた上で出てくる結論として、とても健全です。

生成AIに「いきなりイノベーションの種類」を求めるのは、構造的に無理がある
ただし、イノベーションに“到達する速度”
を劇的に上げることはできる

これが一番正確な言い方だと思います。』

とAI自身はその限界について回答した。
またイノベーションに対するAIの使い方
については

『生成AIに期待すべき正しい役割

今回の議論を踏まえると、役割分担はこう
です。

人間（研究者・技術者）

- 違和感に気づく
- 常識を疑う問いを立てる
- 実験事実を提示する

生成AI

- 常識側の設計空間を高速に展開
- 条件が揃った瞬間に「捨てる」を浮上させる
- 非常識案を定量・論理で支える

つまり、

AIは“発想の源泉”ではなく、“発想の加速器・翻訳器”です。』

と述べている。

【総括】

生成AIは大量に学習したテキスト情報を元に推論を重ねていく。その意味では高速な推論は行っても人間と似た結論に収束す

る場合が多い。全く新しいことを生み出すことはまだまだ発想の豊かな人間にはかなわない。技術者として豊富な経験に裏打ちされた知識は大事であるがそれだけでは膨大な学習をする生成 AI にいずれ追い越される可能性が高い。これからの技術開発では AI では簡単には思いつかないような発想力が必要になる。

(2026/2/15)