

高橋 啓介

物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点  
研究員

実験・計算・データ科学の統合によるメタン変換触媒の探索・発見と  
反応機構の解明・制御

## § 1. 研究実施体制

### (1)「高橋」グループ

- ① 研究代表者:高橋 啓介 (物質・材料研究機構情報統合型物質・材料研究拠点 研究員)
- ② 研究項目
  - ・データベース構築・整備
    - ハイスループット計算プログラム開発・運用
    - GPAW による反応経路マップ作成
    - 文献データの集積
  - ・データベースからの知識
    - 活性化エネルギーの高速予測技術開発
    - 記述子探索と触媒・実験環境予測
    - 反応経路理解
  - ・データプラットフォーム
    - データベース環境整備
    - システム開発・運用

### (2)「宇野」グループ

- ① 主たる共同研究者:宇野 毅明 (国立情報学研究所情報学プリンシプル研究系 教授)
- ② 研究項目
  - ・データベース構築
    - GRRM による反応経路マップ(メタンの化合プロセスにおける中間物質ネットワーク)作成
  - ・データベースからの知識

- 機械学習手法開発(触媒の作用の予測に対するデータマイニング的な手法の開発)
- 記述子探索予測
- 反応経路理解(データマイニングによる触媒作用時の化合プロセスルート推定)

(3)「大山」グループ

- ① 主たる共同研究者:大山 順也 (名古屋大学大学院工学研究科 助教)
- ② 研究項目
  - ・データベース構築
    - 従来型実験によるデータ集積
    - 文献データの集積
  - ・データベースからの知識
    - 実験実証(触媒開発・中間体・最終体の特定・触媒構造解析)
    - 実験プロセスの最適化

(4)「谷池」グループ

- ① 主たる共同研究者:谷池 俊明 (北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科(物質化学領域) 准教授)
- ② 研究項目
  - ・データベース構築
    - サンプル準備
    - ハイスループット実験システム開発
    - 文献調査

## § 2. 研究実施の概要

本研究では**実験・計算・データ科学**を統合した**キャタリストインフォマティクス**を推進し、**新しい革新的な触媒探索・反応機構解明技術**を創出・実践することを目的とし、次の2点の達成に重点を置く。

(1) 新規触媒の設計・実験プロセスの最適化

(2) 触媒反応機構の解明と制御

上記の目標を達成するにあたり、本研究は図1に示されたデータベース構築・データから知識へ変換・統合プラットフォームの3本柱を軸に遂行す

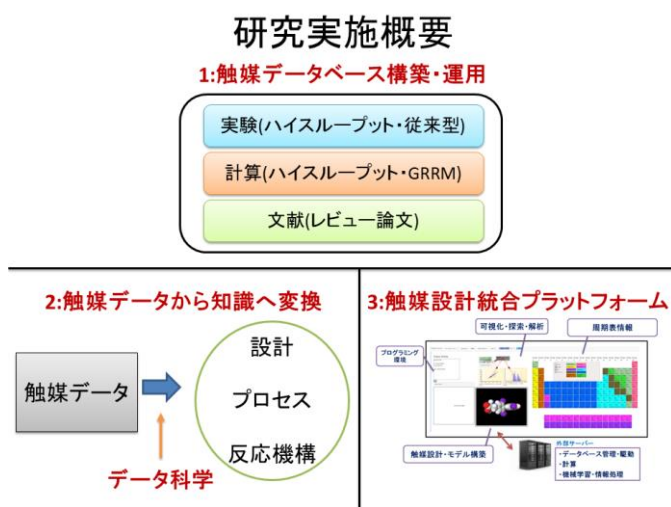


図 1 研究概要

る。平成 29 年度の 6 か月は 3 本柱を実行するための環境整備及び試運転に重点を置いた。

### 1. 触媒データベース構築:

実験・計算・文献の 3 つの異なる特徴のデータベースを構築・運用する。

#### ・実験データベース:

メタン気相反応に特化した 20 個の固定床流通式反応を並列評価可能なハイスループット触媒評価システムに設計・開発し、平成 30 年度中に運用を予定。

#### ・計算データベース:

メタン気相反応に特化した完全自動化ハイスループット第一原理計算のプログラムの設計・開発を行い、運用開始した。また反応経路においては、GRRM の計算環境構築と同時に第一原理計算(GPAW)による反応経路作成を開始した。

#### ・文献データベース:

メタン酸化反応触媒のレビュー論文より 1866 件のデータを習得し、データ科学適用可能な状態にした。

### 2. データから知識へ:

本研究の要となるのが構築された触媒データから知識への変換である。ここで重要となるのが記述子(触媒反応・プロセス・反応経路を決定する因子群)の特定である。本研究では機械学習によりデータを多次元空間に展開し、隠れた秩序や傾向を抽出する。

#### ・文献データからメタン酸化反応触媒を予測:

メタン酸化反応触媒のレビュー論文(1866 件)に対して機械学習を適用しメタン酸化反応において  $C_2$  収率 30% を達成する触媒予測に成功<sup>1</sup>し、実験実証を行っている。

### 3. 触媒統合データプラットフォーム開発:

本研究を遂行する上で共同研究グループ内でのデータ・可視化・解析等の情報処理技術の共有が必須事項である。そこでキャタリストインフォマティクスのための触媒統合プラットフォームの設計・開発を行った。プラットフォーム名は「Catalysts Acquisition by Data Science (通称:CADS)」とし、データベース構築共有環境・データ閲覧選択環境・データ可視化・機械学習環境の設計・開発を行った。平成 30 年度中にはサーバーでの運用予定である。同時にデータベースの構造・分類・定義に対するオントロジー(統一的枠組み)を明確化し、円滑なデータベース構築を行った。

発表論文:

1: "Unveiling hidden catalysts for the oxidative coupling of methane based on combining machine learning and literature data"

Keisuke Takahashi, Itsuki Miyazato, Shun Nishimura, Junya Ohyama

ChemCatChem (Accepted) <http://dx.doi.org/10.1002/cctc.201800310>.

In Press