

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

終了報告書（探索研究）

令和4年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名: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・教授]

[研究開発課題名:超広域材料探索を実現する材料イノベーション創出システム]

実施期間：令和4年10月1日～令和7年3月31日

§1. 研究実施体制

(1)「ハイスループット実験グループ、及び社会実装」グループ(北陸先端科学技術大学院大学)

① 研究開発代表者: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、教授)

② 研究項目

- ・ハイスループット実験技術の実装
- ・機械学習法の開発
- ・触媒ビッグデータの取得
- ・材料シーズ創出
- ・産業界へのヒアリング
- ・知財マネジメント

(2)「データ科学」グループ(北海道大学)

① 主たる共同研究者:高橋 啓介(北海道大学大学院 理学研究院、教授)

② 研究項目

- ・機械学習法の開発
- ・材料シーズ創出
- ・プラットフォーム開発

§2. 研究開発成果の概要

材料開発にかつてない難度と速度が要求される中、研究開発現場の課題は、研究のグランドデザインを真に効率的なデータ駆動型のそれへと転換する基盤技術及び人材の欠如にある。本研究開発の目的は、①高品質な材料ビッグデータを自製するハイスループット実験技術、及び材料探索を効率化するデータ科学技術を基盤とする、超高効率な材料イノベーション創出システムを構築し、周期表の大部分を網羅するような前例の無い規模の材料探索を行い、具体的な材料シーズの発見を以てシステムの有効性を実証すること、及び、②システムの社会普及を推進する構想を準備することである。

探索研究では、メタンの低温ドライリフォーミングを例題に据え、日に 20 触媒の調製・評価、3000 データの蓄積を可能にするハイスループット実験技術を実装した。さらに、事前知識無しで高精度な回帰を与える自動記述子設計技術やその効率化のための MonteCat 法を開発し、これらによってデータ駆動型アプローチの未探索材料空間への適用を阻んできた、2 つの課題(十分な質と規模を備えた実験データの欠如、及び、記述子設計におけるドメイン知識への依存)を解決した。計画的なサンプリングに基づきハイスループット実験と記述子設計をループさせる能動学習を通じて、61 元素から構成され、少なくとも 10^9 個の触媒を内包する広大な組成空間を、仮定や前提を置くことなくゼロベースで探索し、高収率や高安定性を特徴とする多数の触媒シーズを見出し、材料イノベーション創出システムの概念実証に成功した。自動記述子設計技術を触媒データウェブプラットフォーム CADS 上に実装し、頒布の基盤を整えた。特許 4 件を申請した他、約 150 社を対象にヒアリングを実施し、協賛企業 22 社の獲得、かつ、社会実装構想の具体化に成功した。

【代表的な原著論文情報】

1. Toshiaki Taniike*, Aya Fujiwara, Sunao Nakanowatari, Fernando García-Escobar, Keisuke Takahashi, Automatic feature engineering for catalyst design using small

- data without prior knowledge of target catalysis, *Communications Chemistry*, 7, 2024, 11 (pp. 1–8). プレスリリース・新聞掲載
2. Fernando García-Escobar, Toshiaki Taniike, Keisuke Takahashi*, MonteCat: A Basin-Hopping-Inspired Catalyst Descriptor Search Algorithm for Machine Learning Models, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 64, 2024, 1512–1521.
 3. Wentao Du, Patchanee Chammingkwan, Keisuke Takahashi, Toshiaki Taniike*, Unbiased dataset for methane dry reforming and catalyst design guidelines obtained by high-throughput experimentation and machine learning, *Journal of Catalysis*, 442, 2024, 115930 (pp. 1–13).