

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

高橋 啓介（北海道大学大学院理学研究院 教授）

主たる共同研究者

宇野 毅明（情報・システム研究機構国立情報学研究所 教授）

大山 順也（熊本大学大学院先端科学研究部 准教授）

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）

西村 俊（北陸先端科学技術大学院大学先端科学技術研究科 准教授）

3. 事後評価結果

○評点（2022年度事後評価時）：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

（以下、2022年度課題事後評価時のコメント）

本研究課題は、実験・計算・データ科学を統合した触媒インフォマティクスを推進し、旧然としたこれまでの触媒開発方法論から脱却し、従来の枠を超えた新しい方法で触媒開発結果を与える方法論の確立を目指している。論文に報告されたメタン酸化カップリング触媒の性能データと反応条件データをデータベース化し、データ科学的手法から評価に必要な要素を明確にし、実際に新しい触媒構成元素を提示した。同時に膨大なデータを自前で収集するハイスループット装置を組み上げ、過去30年で蓄積されたデータ数を一桁上回る12,000点ものデータを数日で取得することにも成功した。触媒インフォマティクスとして必要な実験条件が統制された形でデータ取得を早期に実施し、また同時に触媒記述子を設計するなどして、計算・データ科学からの触媒設計手法をより精緻なものにし、実際に有効な新しい触媒をいくつも見出すに至っている。また、オントロジーを導入して触媒ビッグデータ内の関係性をネットワークとして記述すること、あるいは触媒の新たな記述方法の提案、計測データのインフォマティクス化などの方法論を新たに開発し、これらによっても数々の新しい触媒を見出すに至っている。一方、外部活動についても実施し、収集したデータが可視化、機械学習、画像解析できる触媒プラットフォーム「CADS: Catalysts Acquisition by Data Science」の開発に成功し、Web上で公開している。国内外の大学、企業などで幅広く利用され、また企業との連携で社会実装も進んでいる。現在では世界初の触媒実験データセンターとしても機能している。

以上のように、触媒作用は複雑現象でありながらも、本チームは触媒インフォマティクスが本来的に持つ不確実性をもろともせず果敢に挑戦しており、またさらに進化すべく、触媒を設計する方法論や種々のインフォマティクスも取り入れながら活動を活発に実施し、多くの成果を上げたことは高く評価する。これらの研究で触媒インフォマティクスという革新領域に成功裡に踏み込めたことになり、時機を得た研究であった。現在、触媒特有の記述子に展開しつつあり、メタンからメタノールへの触媒インフォマティクス展開も展開中であり、今後を注目したい。

（2024年3月追記）

触媒インフォマティクスによる触媒探索法の高度化を実施した。実験結果を学習データに加えてベイズ最適化/機械学習予測という方法により機械学習を鍛錬することに成功し、また計測データの触媒記述子化も実施して分析と収率の相関を機械学習によって特定し、触媒の表面状態に従った活性触媒創出に成功した。触媒インフォマティクス手法「MonteCat」法も開発した。これによりこれまで選定が困難

であった記述子を莫大な触媒特長量から効率的に選定でき、特に機械学習の線形回帰が適用できる触媒記述子を探索できることに成功した。これは機械学習による外挿の触媒予測が可能になった世界初の成果である。さらに証拠理論や結晶データベースを取り込んだ方法論の検証が進んだ。以上により性能に優れた新たなメタン酸化触媒を見出している。またプラットフォーム「CADS」ではデータ科学による画像解析技術とベイズ最適化のグラフィックユーザーインターフェイスを実装し、さらなるユーザーの拡大を図った。以上のように触媒インフォマティクス方法論のさらなる発展を導いた。今後より高次の科学的展開能を備えた触媒インフォマティクス方法論へと発展するものと期待される。