

未来社会創造事業（探索加速型）

「共通基盤」領域

年次報告書（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 5 年 4 月 1 日～令和 6 年 3 月 31 日

§1. 研究開発実施体制

(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
- ・機械学習法の開発
- ・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データ駆動型にリデザイン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2つである。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、及び材料探索を指導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。②システムの社会普及を担う事業体を構想し、企業へのヒアリングを通してその前駆体たるコンソーシアムを設立する。

今年度は、前年度に確立したハイスループット実験技術と自動特徴量設計技術を活用し、メタンドライリフォーミング (DRM) に関する触媒探索を実施した。まずは、元素組み合わせと組成を乱数で定めた計 277 触媒の DRM 性能を取得し、初期訓練データとして用いた。次に、最遠点サンプリングを通して再帰的に訓練データを補強し特徴量設計を更新することで、多様な組み合わせや組成に対して汎的に機能する予測モデルを獲得した。現在、シーズ創出に向けた探索範囲の拡張を行っており、これまでに Ni に対して相乗作用を示す組み合わせや炭素析出の少ない組成物などが見つかっている。また、特徴量設計技術をウェブプラットフォームとして社会実装するために、特徴量選択の効率を飛躍的に改善する新規技術 MonteCat 法を開発し、任意組成物に対して特徴量付与・合成をクリックのみで実行可能なグラフィックユーザーインターフェースも実装した。さらに、社会実装準備として、150 社に対するヒアリング、基本特許に係る調査、知財ポートフォリオ戦略や知財ガイドラインの策定を完了した。

【代表的な原著論文情報】

1. Toshiaki Taniike*, Aya Fujiwara, Sunao Nakanowatari, Fernando García-Escobar, and Keisuke Takahashi, Automatic feature engineering for catalyst design using small data without prior knowledge of target catalysis, *Commun. Chem.* 2024, 7, 11 (pp. 1–8).
2. Fernando Garcia-Escobar, Toshiaki Taniike, and Keisuke Takahashi*, MonteCat: A Basin-Hopping-Inspired Catalyst Descriptor Search Algorithm for Machine Learning Models, *J. Chem. Inf. Model.* 2024, 64, 1512–1521.
3. Kyo Yanagiyama, Ken Takimoto, Son Dinh Le, Nhan Nu Thanh Ton, and Toshiaki Taniike*, High-throughput experimentation for photocatalytic water purification in practical environments, *Environ. Pollut.* 2024, 342, 122974 (pp. 1–8).