

「外挿的」探索を可能にする機械学習モデルの開発と CO₂ 還元反応に有効な新規触媒探索への展開

(産総研) ○峯 真也

Development of a machine learning model that enables "extrapolative" search and its application to the search for new catalysts effective for CO₂ reduction reactions (*Research Institute for Chemical Process Technology, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*) ○Shinya Mine

Data-driven materials development, which uses machine learning (ML) and other artificial intelligence (AI) techniques to accelerate the development of materials and catalysts, is attracting attention. Successful examples of "optimization research" with defined rules and goals are already emerging, including significant reductions in development time and cost. On the other hand, the development of truly innovative materials and catalysts has yet to be achieved. This is because conventional AI technology cannot suggest information that is not contained in the data. In addition, the significant time and cost involved in collecting high-quality experimental data for learning also hinders the spread of data-driven research. In other words, there is a need to develop new ML approaches that can explore "extrapolated regions" of the training dataset and that can be used even with relatively small datasets.

In this talk, we will present the ML model we developed that enables "extrapolative" search. Furthermore, we will present a case study in which we found a multi-element catalyst effective for the reverse aqueous gas shift reaction to synthesize CO from CO₂/H₂ by using the developed ML model and running a closed loop of experiment (evaluation) ↔ machine learning starting from a small set of training data.

Keywords : Machine Learning; Heterogeneous Catalysts; CO₂ Reduction

機械学習をはじめとする人工知能(AI)の技術を用いて材料・触媒開発を加速化する、「データ駆動型」材料開発が注目を集めており、ルールとゴールが明確な「最適化研究」においては、開発にかかる時間とコストを大幅に削減する等の成功例がすでに出始めている。一方、真に革新的な材料・触媒の開発は未だ達成されていない。革新的な材料・触媒の発見は、今までのデータ中に無い、もしくは極めて少ない元素の活用等から生まれるものであるが、従来型の AI 技術ではデータの中に含まれていない情報は提案できないためである。また、学習に用いる良質な実験データを収集するために多大な時間的・金銭的コストがかかることも、データ駆動型研究の普及を妨げている。すなわち、学習データの「外挿領域」まで探索が可能で、かつ、比較的小さなデータセットでも利用できる新しい機械学習手法の開発が求められている。

本講演では、我々が開発した「外挿的」探索を可能にする機械学習モデルについて紹介する。さらに、開発した機械学習モデルを用い、少数の学習データから出発して実験(評価)↔機械学習のクローズドループを回すことで、CO₂/H₂ から CO を合成する逆水性ガスシフト反応に有効な多元素触媒を見出した研究事例についても紹介する。