

文部科学省と国立大学附置研究所・センター 個別定例ランチミーティング

第54回 北海道大学 触媒科学研究所 (2023.8.18)

- | | |
|--------------------|--|
| 12:05 – 12:10(5分) | : 研究所概要 清水研一所長 |
| 12:10 – 12:25(15分) | : 若手研究者からのプレゼン
「外挿的提案が可能な機械学習による固体触媒開発」
鳥屋尾 隆 助教 |
| 12:25 – 12:45(20分) | : 質疑応答 |

触媒科学研究所 (Institute for Catalysis)

沿革

触媒科学に関する研究を行い、かつ、国立大学の教員その他の者で、この分野の研究に従事する者の利用に供する。

1943年 触媒研究所の設立

1989年 触媒化学研究センターとして改組

2007年 ターゲット研究部設置（准教授を准PI化）

2015年 触媒科学研究所として改組



ミッション

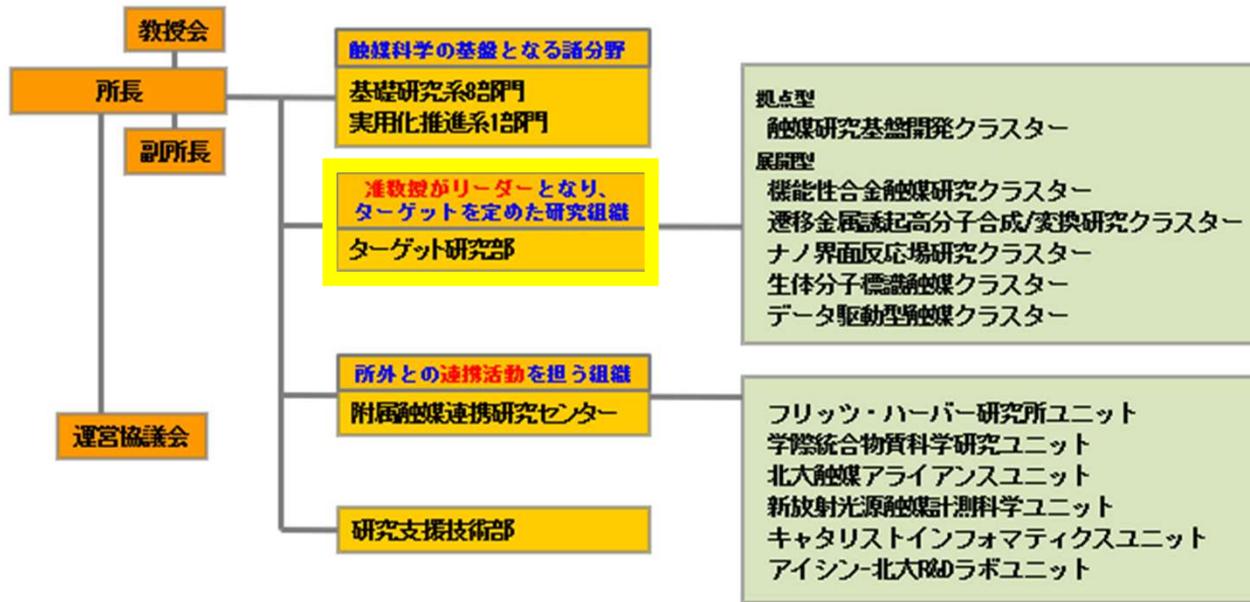
エネルギー・資源の多様化と高度利用に資する触媒の原理解明および新触媒合成技術の開発を進め、新規触媒の実用化を推進して、触媒先導イノベーションを起こし、持続可能社会を実現する。

第4期中期計画における課題

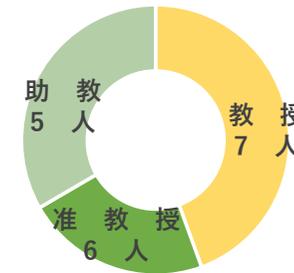
- カーボンニュートラル社会実現にむけた新しい学術・技術基盤の確立
- 触媒開発の合理化による国際競争力向上

組織

触媒と関連分野の研究者が集めた学際的組織

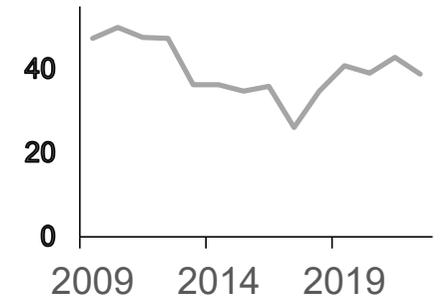


教職員



- 技術職員：8人
 - 事務職員：27人
- 2023年3月31日時点

若手(<39歳)教員率(%)



北海道大学	国立大R3年度
20%	22%
(出所) 文部科学省「学校教員統計調査」	

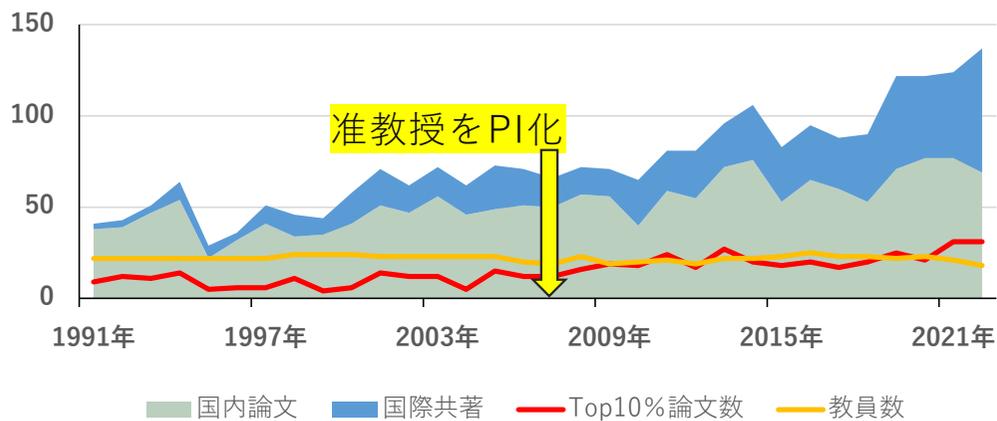
若手研究者の昇進状況 (過去3年)



03

研究力・研究費の推移

論文数



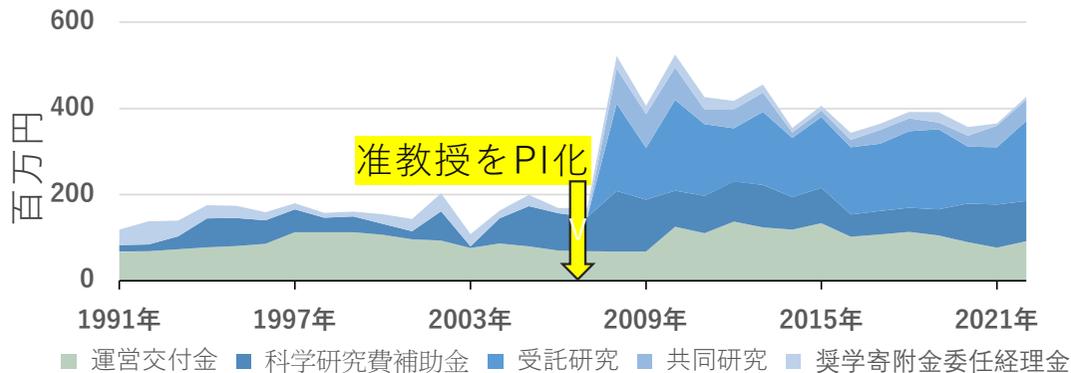
※2017年～2022年平均

教員1人あたり論文数
5.5 報

Top10%論文数
0.8 報

2022年

研究費



教員1人あたり外部資金獲得額

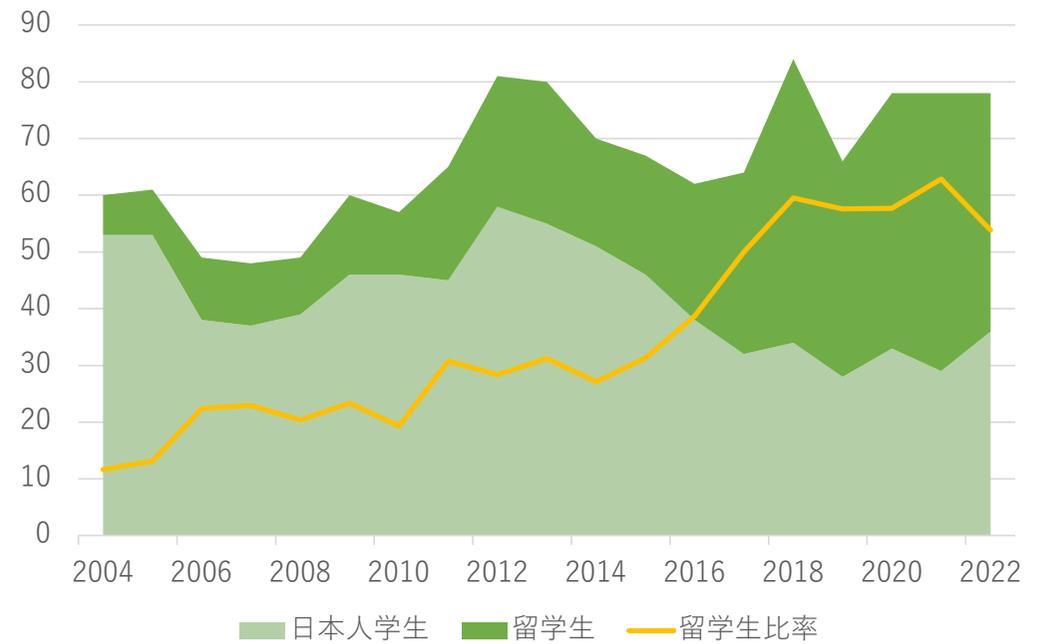
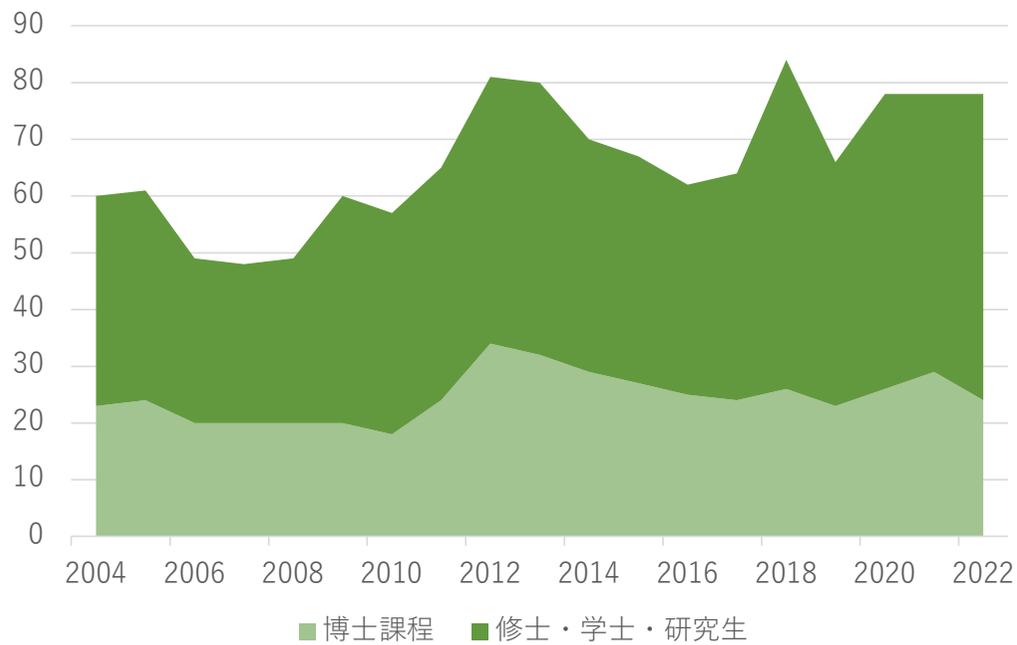
18.6
百万円



(出所) Web of Science (論文数) 各研究所刊行物 (教員数)

04

学生の構成



触媒による青果物鮮度保持 ⇒ フードロス削減

未熟果バナナの保存 (27日後の外観)



触媒によりエチレンが除去され熟成が抑えられる



✓ 野菜の歩留まり5-10%向上
(コンビニ用倉庫で実証)

北大のSDGs2研究力向上に貢献

- ✓ THE インパクトランキング2022で総合世界10位/1406大学
- ✓ SDG2「飢餓」は世界1位

総合ランキング

世界1406大学中

10位 (国内1位)



SDGs別ランキング (SDG2)

世界553大学中

1位





触媒による食品ロス削減

触媒を用いた青果物保存の長期化技術を展開し、北海道科学技術総合振興センター、北海道立総合研究機構、セコマグループとともに設立したフードロス削減コンソーシアムを核とする協同体制を構築し、フードロス問題などの課題解決に貢献。

国内唯一の触媒研究拠点 触媒科学計測共同研究拠点

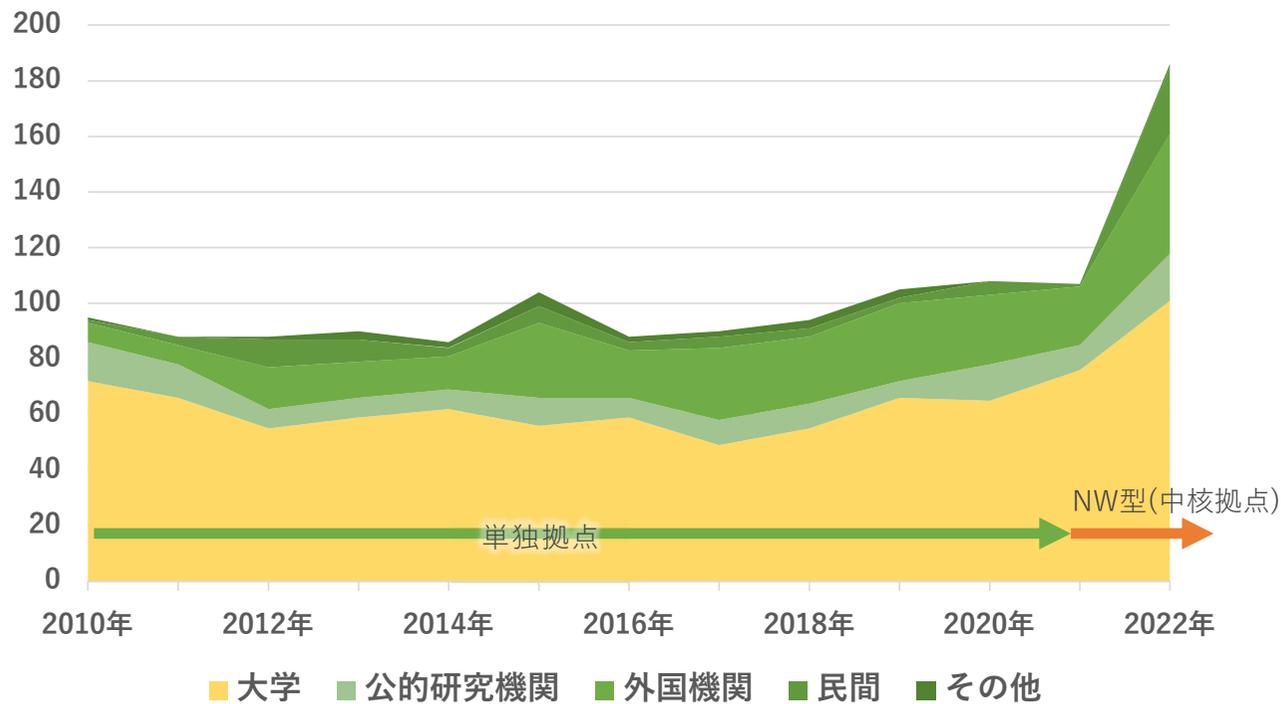
   	<p>中核機関：北海道大学 触媒科学研究所 (ICAT) 持続可能社会を実現する触媒科学の創成</p> <p>産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター(IRC³) 社会課題の解決と産業競争力強化</p> <p>大阪公立大学 人工光合成研究センター(ReCAP) 人工光合成研究による環境問題の解決 および新エネルギーの創出</p> <p>学術協力：東北大学 国際放射光イノベーション・ スマート研究センター (SRIS) 次世代放射光の活用による 学術的挑戦性と産業的革新性の融合による産学共創</p>
--	--



「触媒科学計測共同研究拠点」事業

北大触媒研を中核拠点として大阪公立大学人工光合成センター、産業技術総合研究所触媒化学融合研究センターと共に**連携ネットワーク型共同利用拠点**事業を**2022年度より開始**。国内外研究機関との共同研究と研究者間交流を推進。

所外との共同研究数

民間との
共同研究

※ 2022年度

国外との
共同研究

※ 2022年度

所内共同研究数



07件

※ 2022年度

外挿的提案が可能な機械学習による 固体触媒開発

北海道大学 触媒科学研究所 清水研究室 助教
鳥屋尾 隆 (とやお たかし)

略歴

鳥屋尾 隆(とやお たかし) 34歳

学歴

2007年3月 島根県立出雲高等学校 卒業
2007年4月 大阪府立大学工学部応用化学科 入学
2011年3月 大阪府立大学工学部応用化学科卒業(松岡雅也研究室)
2013年4月 大阪府立大学大学院 博士前期課程修了
2015年9月 大阪府立大学大学院 博士後期課程修了
博士(工学)の学位取得
論文名「金属-有機構造体を利用した高機能触媒の設計と応用」
※在学中に、JSPS 頭脳循環を加速する 戦略的国際研究ネットワーク推進プログラムの支援を受けて、ドイツ(6か月)、オーストラリア(6か月)に研究留学

職歴

2013年4月 独立行政法人日本学術振興会 特別研究員 (DC1)
2015年10月 独立行政法人日本学術振興会 特別研究員 (PD)
2015年12月~ 北海道大学 触媒科学研究所 助教 (清水研一研究室)
2016年1月~ 2022年3月 京都大学 触媒・電池ユニット(ESICB) 特定助教 (兼任)
※2019年度に、JST CRESTの支援を受けて、オランダ(3か月)に研究留学
※2022年度より、JST創発的研究支援事業研究者

研究分野

触媒化学(CO₂変換、排ガス浄化(DeNOx)等)、マテリアルズインフォマティクス(触媒インフォマティクス)

AI and machine learning techniques can be applied in almost every field

Search Engine



Translation



Self-driving



Security



Advertising



Transportation



Weather



Medicine



- ・ 機械学習を中心としたAI技術は、社会において不可欠なツール
- ・ サイエンス(の方法論)に対してもすでに大きな影響

ARTICLE

doi:10.1038/nature25978

Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic AI

Marwin H. S. Segler^{1,2}, Mike Preuss³ & Mark P. Waller⁴

REVIEW

https://doi.org/10.1038/s41586-018-0337-2

Machine learning for molecular and materials science

Keith T. Butler¹, Daniel W. Davies², Hugh Cartwright³, Olexandr Isayev^{4*} & Aron Walsh^{5,6*}

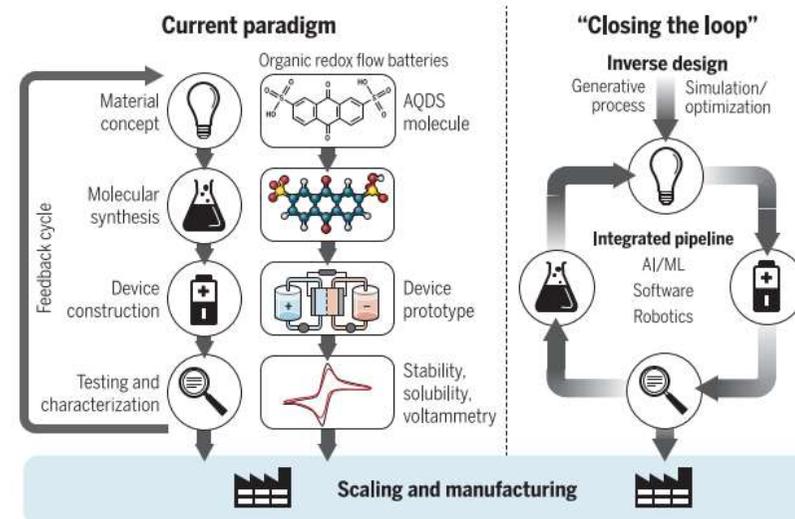


Fig. 1. Schematic comparison of material discovery paradigms. The current paradigm is outlined at left and exemplified in the center with organic redox flow batteries (92). A closed-loop paradigm is outlined at right. Closing the loop requires incorporating inverse design, smart software (93), AI/ML, embedded systems, and robotics (87) into an integrated ecosystem.

Sanchez-Lengeling and Alán Aspuru-Guzik, *Science* 361, 360–365 (2018)

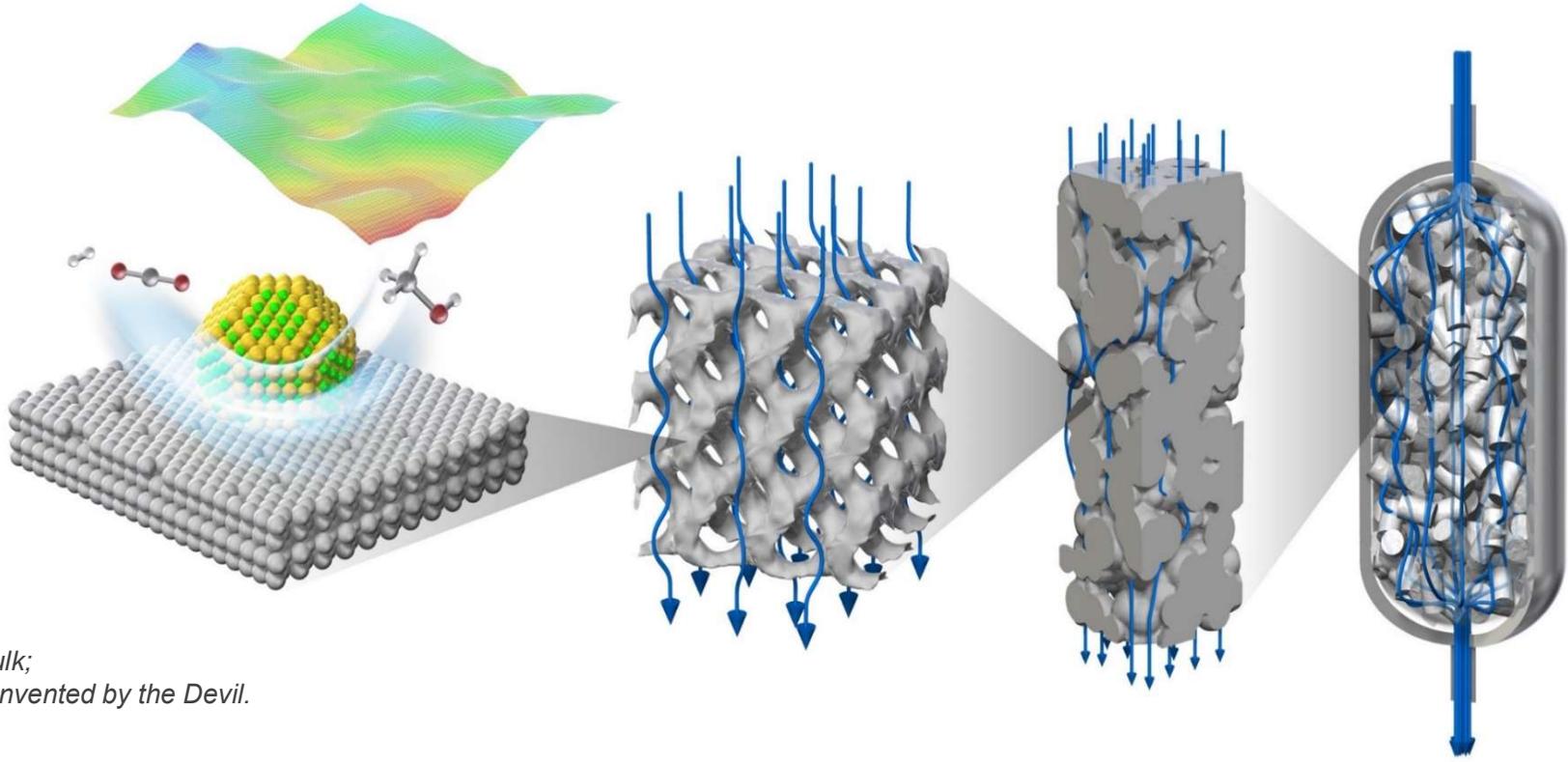
Material/Molecular Informatics分野はすでに一定の成功を収めているが、
真に革新的な物質・反応の開発は未だ達成が困難

→ 機械学習は、“最適化研究”においては力を発揮するが、
外挿領域に存在する真に革新的な物質を探索するには不向き

How about ML-aided catalysis research? (Catalysis Informatics)



God made the bulk;
the surface was invented by the Devil.



Length, time

ACS Catalysis 2020 (Review)

触媒分野などの物質のダイナミクスが重要となる分野におけるデータ科学利用は大きく後れている
—幅広い空間・時間スケールでの複雑現象を十分な計算速度・精度で記述する理論は確立されていない
—固体触媒分野ではハイスループット実験も難しく、実験データベースも小さい(触媒数 = 数十-数百程度)

What makes for a suitable problem?

- ✓ Massive combinatorial search space
- ✓ Clear objective function (metric) to optimize against
- ✓ Either lots of data or an accurate and efficient simulator

Demis Hassabis@Deepmind

Aspect	Typical successful ML tasks (Image recognition etc.)	ML in science (Material/catalysis informatics)
Data availability (Number of datapoints)	Very large, typically > 100 million	Small, typically < 1000
Cost of data acquisition	Low	High
Data heterogeneity	Possible to achieve high homogeneity	Typically multimodal with high heterogeneity
Data quality	Typically no error	Can be large error
Interpretability	Typically less important	Important
Purpose	Substitution of human	New/novel discovery

何のデータをどのように(どこから)大量に取得するか？

- ✓ Public databases
ここ10年程度で急速に整備されつつあるが、
未だ量的に不十分 + バルク物性が中心 + 構造既知の物質がほとんど
- ✓ Public databases for surface (reactions)
データ量少ない。金属中心。
最近話題!?!のMatlantis等のNNP利用パッケージも未だ実験との乖離大
- ✓ Literature data
実験条件バラバラで比較難しい。
バイアス大。単に研究トレンドを反映した”データ解析”で終わりそう。
※新規/新奇触媒の開発にはつながらない!?
- ✓ High-throughput experiments (using robots)
値段高い。。。Automation isn't automatic...
- ✓ Public experimental databases
(固体)触媒分野でどこまで機能するかは未知数

→ 単独グループ取得できる程度の小データセット(+バイアス大)でも機能し、かつ、
新発見(外挿的探索)を可能にする手法が必要



Machine Learning May Sometimes Simply Capture Literature Popularity Trends: A Case Study of Heterocyclic Suzuki–Miyaura Coupling

Wiktor Beker, Rafal Roszak, Agnieszka Wolos, Nicholas H. Angello, Vandana Rathore, Martin D. Burke,* and Bartosz A. Grzybowski*



Chemical Science



PERSPECTIVE

View Article Online
View Journal

Check for updates

Automation isn't automatic

Cite this: DOI: 10.1039/d5cc04588a
All publication charges for this article

Melodie Christensen,^a Lars P. E. Yunker,^a Parisa Shiri,^a Tara Zepel,^a Paloma L. Prieto,^a Shad Grunert,^a Finn Bork* and Jason E. Hein*



A Unified Research Data Infrastructure for Catalysis Research – Challenges and Concepts

Christoph Wulf,^a Matthias Beller,^a Thomas Boenisch,^b Olaf Deutschmann,^c Schirin Hanf,^d Norbert Kockmann,^e Ralph Kraehnert,^f Mehtap Oezaslan,^g Stefan Palkovits,^h Sonja Schimmler,ⁱ Stephan A. Schunk,^{j,k} Kurt Wagemann,^l and David Linke^a

The Digitalization of Catalysis-Related Sciences



外挿的な機械学習予測

機械学習を触媒・材料開発に適用する際の課題

データセットに含まれる元素に縛られた「**内挿的**」提案しかできず、「**外挿的**」提案はできない

従来の「**内挿的**」機械学習モデル

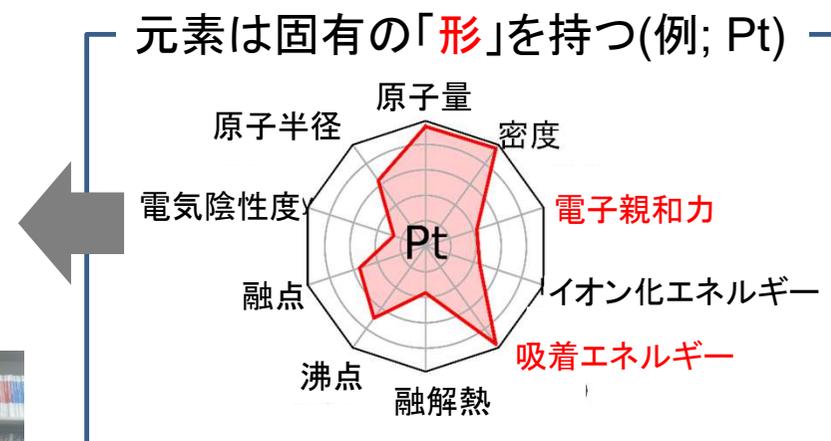
従来の機械学習モデルでは元素を単なる「**シンボル**」として扱うだけであり、各元素固有の性質がモデルに反映されない

考案した「**外挿的**」機械学習モデル

元素をただの「**シンボル**」としてではなく、
元素特徴量(**形**)も考慮した“**多次元の特徴量ベクトル**”
として表現
+ 元素特徴量から触媒組成を復元するアルゴリズムも作成



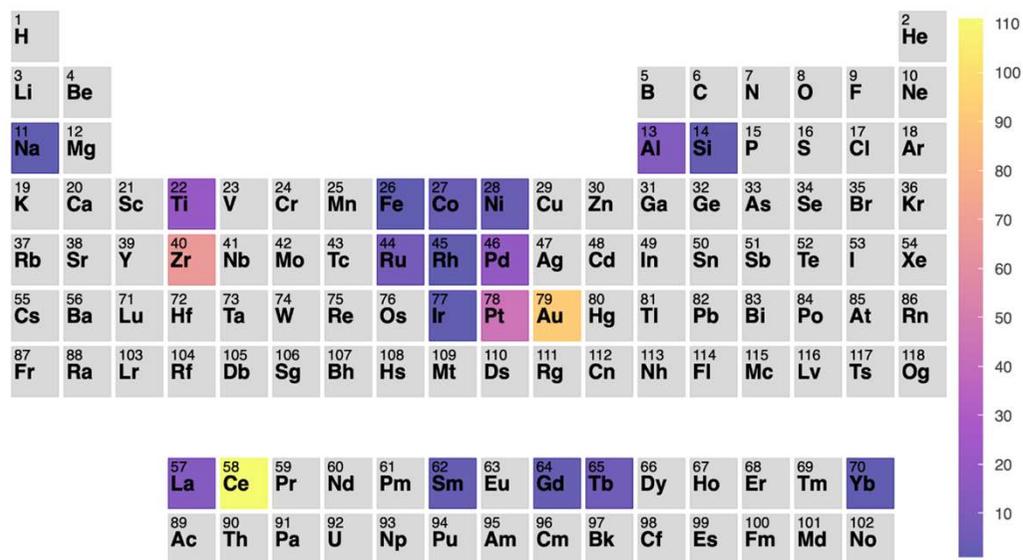
瀧川一学教授
@京都大学



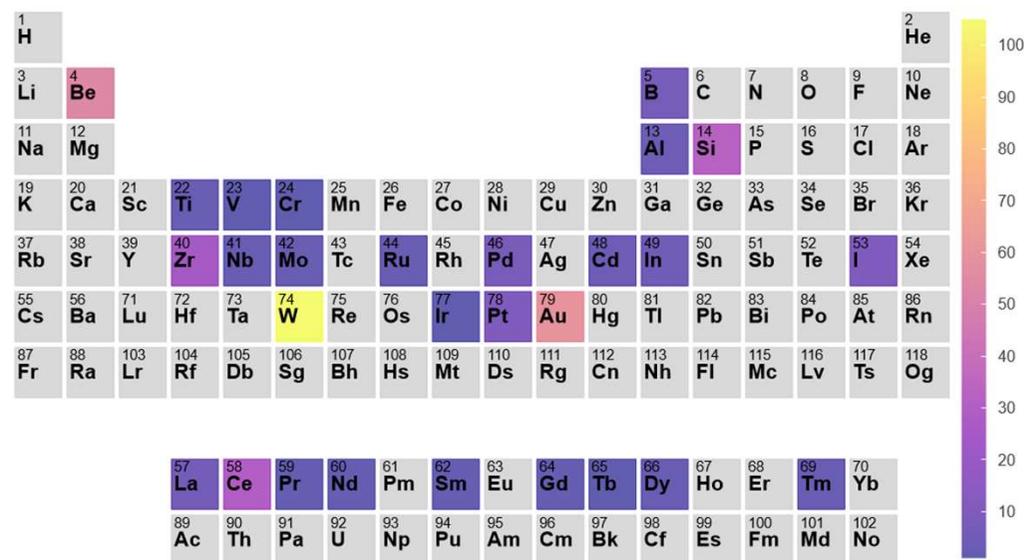
外挿的な機械学習予測

水性ガスシフト反応の文献データを用いたデモンストレーション

(A) 元々のデータセット中の触媒に含まれる元素



(B) 機械学習により提案された触媒に含まれる元素



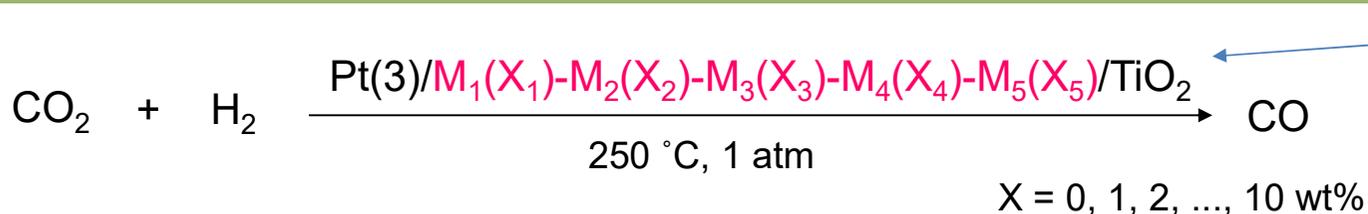
*Elements having the atomic number 3 (Li) through 83 (Bi) except O, Tc, Hg, and noble gasses were used as catalyst component candidates

元素そのものは記述子に使わないので、データセットに無い元素も高い精度で提案可能 +
小さなデータセットや偏りのあるデータセットにも有効

化学・材料科学分野における外挿!?
※データ科学的には内挿

ChemCatChem, 2021, 13, 3636
Chemistry Letters 2022, 51, 269
2022年度 日本化学会進歩賞受賞

外挿的な機械学習モデルを用いた逆シフト触媒探索



← 先行研究(ML利用ナシ)で発見した世界最高活性を示すPt/Mo(10)/TiO₂触媒を凌ぐ触媒を探索する

Original dataset (触媒数45: 全て実験により取得)

2種類の添加元素からなる触媒を含むオリジナルデータセットを作成
 → 5種類の添加元素からなる触媒系にまで探索範囲を拡張

No.	Element 1	Element 1 wt%	Element 2	Element 2 wt%	CO formation rate mmol·min ⁻¹ ·g _{cat} ⁻¹
1	Mo	10			2.5540
2	V	10			0.8244
3	Ce	10			0.5557
4	La	10			0.5492
5	Y	10			0.4326
6	Sr	10			0.4777
7	Ba	10			0.4044
8	Zr	10			0.3301
9	Rb	10			0.2954
10	Mg	10			0.2712
11	Na	10			0.2649
12	K	10			0.2310
13	Ge	10			0.1623
14	Al	10			0.1169
15	Sn	10			0.0723
16	Zn	10			0.0721
17	Ga	10			0.0629
18	In	10			0.0309
19	Cu	10			0.0195
20	Bi	10			0.0051
21	Sb	10			0.0000
22	Mo	2.5	Sr	2.5	2.1511
23	Mo	2.5	Y	2.5	1.8214
24	Mo	2.5	Ce	2.5	2.4294
25	Mo	2.5	La	2.5	2.1121

検討した触媒組成の候補は膨大

5⁰ × 20⁵ = 約600兆

(ca. 白金族元素や毒性・放射性元素を除く50種類)

※4元素としても、50⁴ × 20⁴ = 約6000億

ML model

ExtraTrees Regression (ETR)

記述子として選定した元素特徴量

Electronegativity

Density

Enthalpy of fusion

Melting point

Group

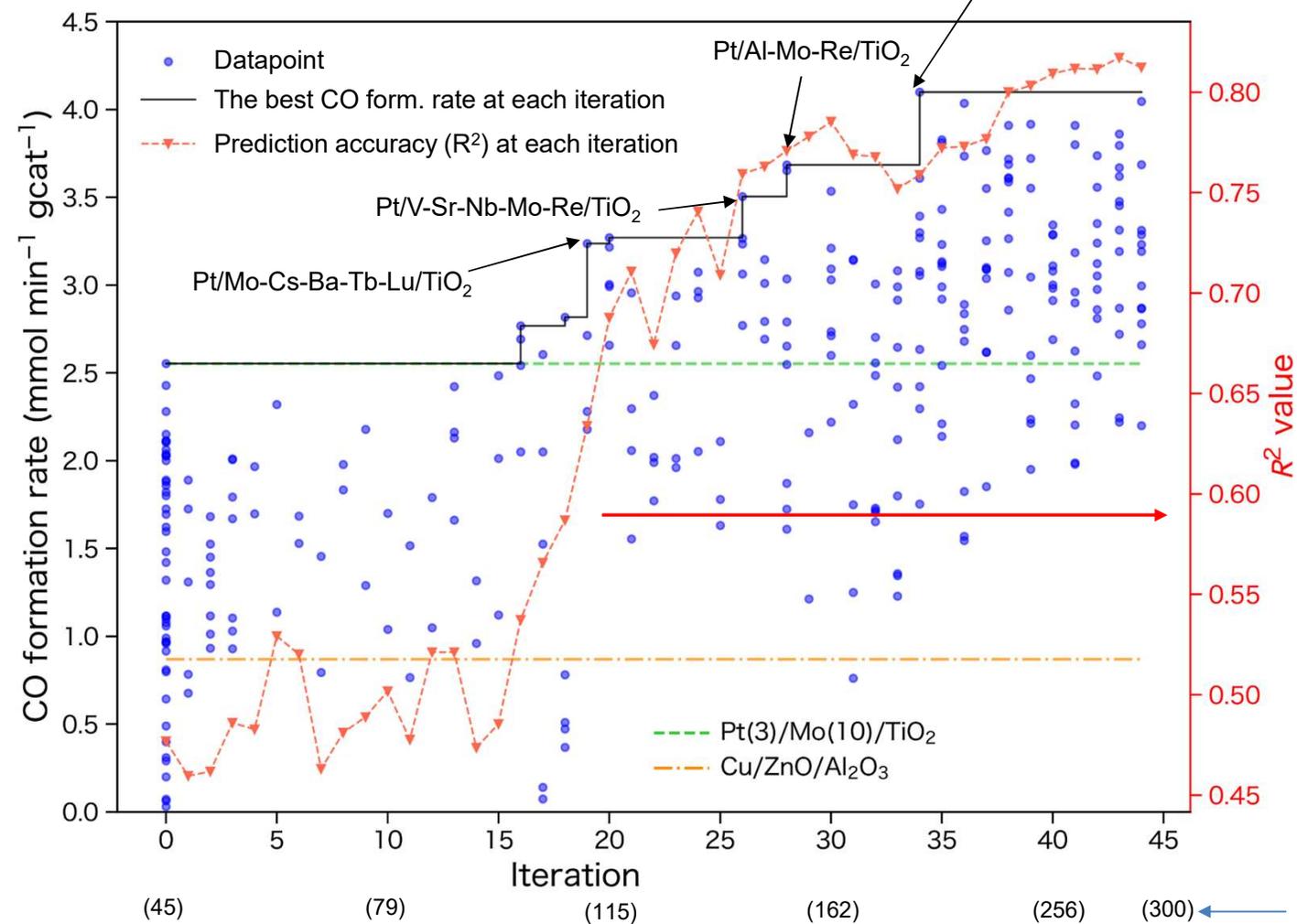
Band gap in the most stable oxide form

Oxidation number in the most stable oxide form

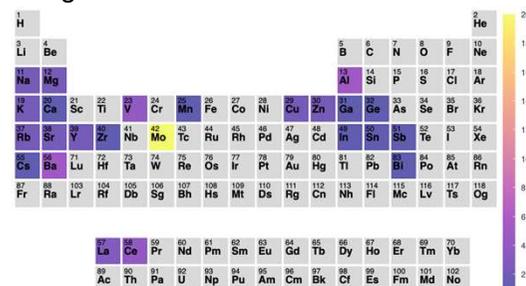
E_{ad} of CO₂ on metallic surface (obtained using VASP)

外挿的な機械学習モデルを用いた逆シフト触媒探索

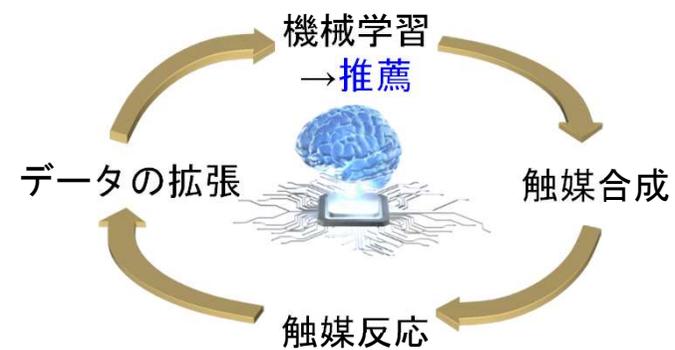
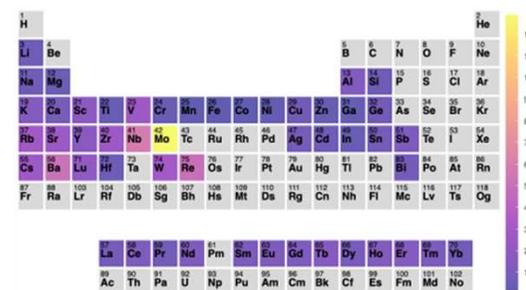
Pt(3)/Rb(1)-Ba(1)-Mo(0.6)-Nb(0.2)/TiO₂



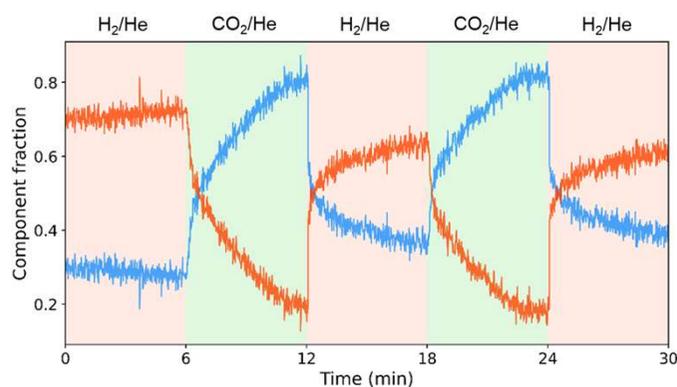
Original



Current



分光・速度論解析による反応機構研究



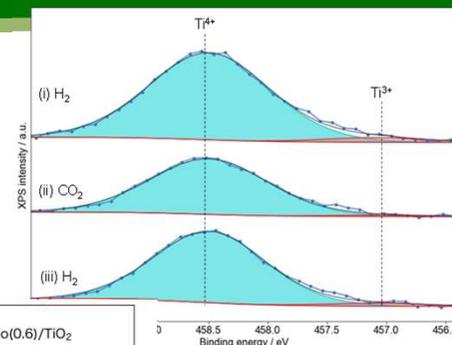
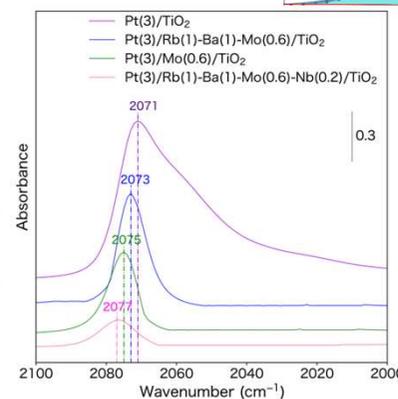
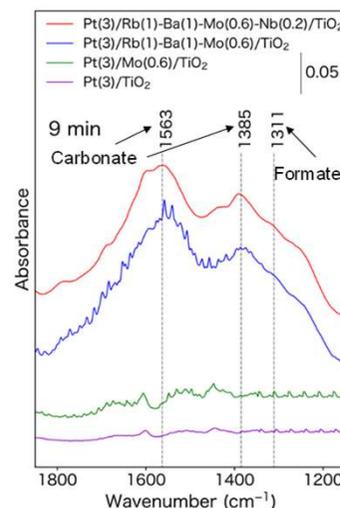
— Component 1
= Oxidized Mo (VI)
— Component 2
= Reduced Mo (IV)



浦川篤教授
@TU Delft



Dr. Davide Ferri
@PSI



近藤寛教授
@慶應義塾大学



各種 *In situ/operando* 分光・速度論解析から、各元素の役割を解明

Element	Function	Method
Mo	Redox	XAS
Ba, Rb	Base	IR
Nb	Modification of electronic structure of Pt	IR, XPS, Kinetic study

Summary and future prospects

- ✓ Extrapolative ML method has been developed using elemental descriptor representation

ChemCatChem 2019, 11, 4537
ChemCatChem, 2021, 13, 3636
Chemistry Letters 2022, 51, 269

- ✓ The ML-assisted research has led to discovery of high-performance catalysts
(Current best catalyst = Pt/Rb-Nb-Mo-Ba/TiO₂)

Nature Communications, in press

将来展望

- ✓ 新(novel)触媒の開発
 - PGM削減、実験条件の考慮、他の反応に対して等
- ✓ 大規模(計算)データの利用
 - 転移学習等
- ✓ 解釈性
 - ブラックボックスとされる固体触媒分野の理解を進める

