

## 証拠理論に基づく触媒推薦システムの開発とハイスループット実験を用いた実証

(北陸先端大<sup>1</sup>・北大<sup>2</sup>) ○中野渡 淳<sup>1</sup>・藤原 綾<sup>1</sup>・高橋 啓介<sup>2</sup>・Dam Hieu Chi<sup>1</sup>・谷池 俊明<sup>1</sup>

Development of Catalyst Recommender System based on Dempster-Shafer Theory of Evidence and its Demonstration via High-throughput Experimentation

(<sup>1</sup>Japan Advanced Institute of Science and Technology, <sup>2</sup>Hokkaido University) ○Sunao Nakanowatari,<sup>1</sup> Aya Fujiwara,<sup>1</sup> Keisuke Takahashi,<sup>2</sup> Chi Hieu Dam,<sup>1</sup> Toshiaki Taniike<sup>1</sup>

A prerequisite for implementation of catalyst informatics is the presence of a dataset with quality, size, and uniformity, and without human bias. In the past, we have acquired a dataset that satisfies the above requirement for the oxidative coupling of methane by using high-throughput experimentation<sup>1)</sup>. In this study, we developed a catalyst recommender system based on Dempster-Shafer theory of evidence, a general framework for modeling epistemic uncertainty, using this dataset. This system can consider combinatorial effects in catalyst design based on similarity of combinations between components such as elements and supports. It assigns probabilities ( $p_{\text{positive}}$ ,  $p_{\text{non-positive}}$ ,  $p_{\text{uncertain}}$ ) to each catalyst according to a threshold of performance and recommends catalysts with  $p_{\text{positive}} + xp_{\text{uncertain}}$  as selection probability. The recommended catalysts were evaluated by high-throughput experimentation. The obtained data was added into the training set to update the system. Such the active learning loop described above was carried out for catalyst exploration in an extrapolative fashion, which successfully led to high-performance catalysts that were dissimilar to those contained in the original dataset. **Keywords :** Catalyst Informatics, High-throughput experimentation, Dempster-Shafer theory of evidence (DST), Active learning, Oxidative coupling of methane

触媒インフォマティクスの実践には、質・規模・均質性を備え、かつ人為的バイアスを排除したデータの存在が前提になる。我々は過去に、メタンの酸化のカップリング反応において、ハイスループット触媒評価装置を用いることで、以上の要件を満たすデータを取得した<sup>1)</sup>。本研究では、このデータを訓練データとして、不確実性をモデル化するための数学的枠組みである証拠理論に基づく触媒推薦システムを開発した。本システムは、元素や担体といった要素間の組み合わせの類似度を触媒の説明変数とすることで、性能予測の際に元素間の組み合わせ効果を考慮することができる。設定した性能閾値に応じて、それぞれの触媒に確率( $p_{\text{positive}}$ ,  $p_{\text{non-positive}}$ ,  $p_{\text{uncertain}}$ )を割り当てる。 $p_{\text{positive}} + xp_{\text{uncertain}}$ を選択確率として触媒を推薦し、ハイスループット実験によって評価する。得られたデータを訓練データに追加し、システムを更新する。以上の能動学習ループによって外挿的な触媒探索を行い、元データの触媒とは系統の異なる高性能触媒を開発することに成功した。

1) T. Taniike et al. *ACS Catal.* **2020**, 10, 921–932

