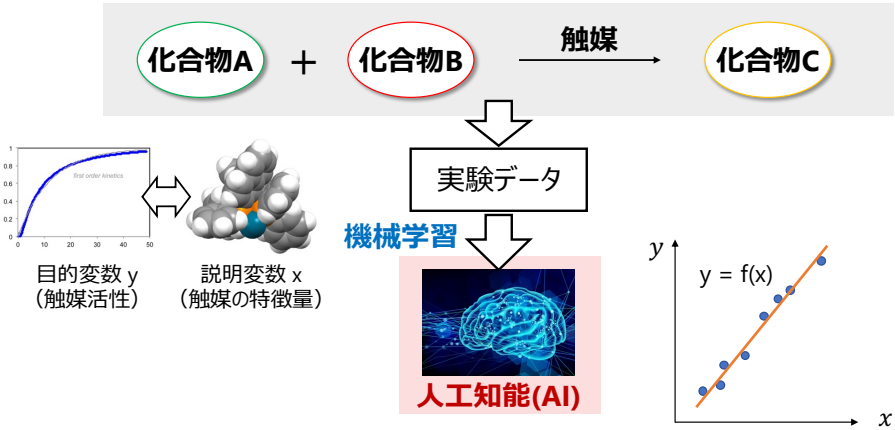
機械学習による触媒反応最適化の基礎

（産総研 触媒化学融合研究セ）○矢田 陽
Fundamentals of Catalytic Reaction Optimization by Machine Learning (Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry (IRC3), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)) ○Akira Yada

In this presentation, the optimization of catalytic reactions using machine learning, including descriptor preparation, use of computational chemistry, and machine learning methods, will be presented. In addition, how catalytic reaction optimization by machine learning will be demonstrated by running the machine learning programs.
Keywords : Catalytic Reaction; Machine Learning; Catalyst Informatics

新規触媒反応の研究開発において触媒構造は触媒活性の鍵となるため、その最適化は重要な作業である。例えば、均一系触媒の場合は中心金属の種類と配位子の構造、不均一系触媒の場合は金属や担持体の種類・組成比や触媒調整方法などを最適化することになるが、いずれも時間や労力が必要とされるだけでなく、実験化学者の勘や経験も要求される。この作業を効率化するために、近年では機械学習の利用が広がりつつある。昨年の日本化学会春季年会では、実験化学者がデータ科学的手法を活用する上での 3 つのハードルが存在し、それらを乗り越えて研究にデータ科学的手法を活用していくために必要なことについて、講演者の体験に基づいて講演した。本講演では、触媒反応の最適化における機械学習を活用について、より実践的な内容を紹介する。すなわち、課題設定や実験データ収集における考え方や、記述子の準備の方法、機械学習法などについて紹介する。また、機械学習による触媒反応最適化がどのように行われるか、実際にプログラムを動かしながら紹介する予定である。



（１）課題設定・・・収率、選択性、反応速度の予測など、研究課題を設定
（２）データ収集・・・説明変数（反応条件、物性値、計算値）と目的変数
（３）予測モデル作成・・・説明変数と目的変数の関係式 y=f(x) ← **機械学習**
（４）推定・・・未知のデータ（説明変数）に対する目的変数の予測

© The Chemical Society of Japan