

データ科学を利用した量子化学計算結果の解析と触媒への応用

(北大院理・JST さきがけ・京大 ESICB) 小林 正人

最近のコンピュータとプログラムの発展により、量子化学計算の適用範囲が大規模系へと拡大し、また長時間ダイナミクスシミュレーションや広大なコンフォメーション空間の探索が可能となってきた。例えば我々も、大規模分子系の量子化学計算を可能とする分割統治法の開発を行ってきた[1,2]。このような状況を背景に、量子化学計算とデータ科学の手法を組み合わせた解析や予測に注目が集まっている。大規模量子化学計算の実行結果であっても、最も重要なプロパティであるエネルギーは単一の値であり、また波動関数そのものの情報は逆に膨大で意味が薄すぎて、データ科学の手法で扱って意味のある結果を得るのは難しい。そこで、本講演ではまず、大規模量子化学計算から局所的な情報を抽出する方法とその応用について述べる。

次に、実際に量子化学計算の結果とデータ科学的手法を用いて、触媒の活性を評価する最近の試みについて紹介する。具体的には、反応経路の系統的探索[3]から得られた遷移状態 (TS) データベースと、LASSO[4]や MC+法[5]に代表されるスパースモデリングの手法を組み合わせることによって、Cu および Au ナノクラスター触媒の活性因子の抽出を行った。スパースモデリングでは、目的変数 y に対して、説明変数 X を用いた最小二乗推定に正則化項 p を加えた以下の目的関数 l を最小化する。

$$l(\beta) = (y - \beta X)^T (y - \beta X) + p(\beta) \quad (1)$$

特に MC+法による活性因子の抽出により、Cu クラスター触媒による NO 解離反応では LUMO の寄与が大きいものに対して、Au クラスター触媒による H₂ 解離反応では HOMO の寄与が大きいことが分かった。

発表では、もう一つの適用例として、遷移金属触媒によるメタン水蒸気改質反応の触媒活性について、報告を予定している。

[1] M. Kobayashi and H. Nakai, in *Linear-Scaling Techniques in Computational Chemistry and Physics* (Springer, 2011), pp. 97-127.

[2] M. Kobayashi and T. Taketsugu, *Chem. Lett.* **45**, 1268-1270 (2016).

[3] S. Maeda, T. Taketsugu, and K. Morokuma, *J. Comput. Chem.* **35**, 166-173 (2014).

[4] R. Tibshirani, *J. Roy. Stat. Soc. B* **58**, 267-288 (1996).

[5] C.-H. Zhang, *Ann. Stat.* **38**, 894-942 (2010).