

「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズ
インフォマティクスのための基盤技術の構築」

2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書

清野 淳司

早稲田大学理工学術院総合研究所
次席研究員/研究院講師

量子化学と情報学との融合による次世代密度汎関数理論と均一系触媒における反応
予測システムの開発

§ 1. 研究成果の概要

本研究課題では、インフォマティクスと電子状態計算を融合させることで初めて達成される二つの研究を遂行する。第一の研究では、電子状態計算手法として広く用いられてきた密度汎関数理論 (DFT) の、最大の難題である厳密な汎関数の構築に挑戦する。第二の研究は、合成化学において必要不可欠である触媒を考慮した化学反応の予測システムを開発する。

第一の研究では、これまでに DFT における Hohenberg-Kohn 定理に基づき、電子密度の情報から機械学習により半局所的な運動エネルギー汎関数を構築する手法を開発した。2018 年度は、上記の汎関数を用いて原子・分子などの局在系の計算を実現するために、軌道に依存しない DFT 計算手法を確立し、分子構造などの情報からエネルギー・分子物性を計算できる枠組みを完成させた。また、定量的な議論ができる精度で高速な計算を実現するために、Gold Standard と評される手法である CCSD(T)/CBS の相関エネルギーを再現する電子相関モデルを、簡便な Hartree-Fock 法による電子密度の情報から機械学習により構築した。その結果、化学的な精度 (1 kcal/mol 以下) を保ちつつ、従来よりも 300 倍以上高速に反応エネルギーを予測できた。

第二の研究では、これまでに有機化合物の化学反応を対象とし、電子状態の情報を記述子として化学反応を予測するシステムを構築した。しかし、データの正例と負例の数のギャップが精度に影響を与えた。そのため 2018 年度は、ランキング形式による生成物の予測をペアワイズ型学習に変更することで問題を解消し、予測精度の向上が確認された。また、均一系触媒の化学反応の可否に関するデータを収集するためには、様々な反応条件における実験データを収集することが重要である。その効率化のために実験化学者と共同して、少ない実験データと多くの反応条件、または溶媒反応条件のみに対する機械学習を用いた最適化手法の開発を行った。その結果、実験化学者の知識や経験に依存せずに、効率的に最適な反応条件や溶媒を提案できた。

§ 2. 研究実施体制

①研究者: 清野 淳司 (早稲田大学理工学術院総合研究所 次席研究員/研究院講師)

②研究項目

- ・機械学習を用いた実用性の高い DFT 汎関数の開発
- ・インフォマティクスによる均一系触媒における化学反応予測システムの開発