

化学反応経路の全面探索の可視化と データマイニングによる発見への取組み

佐藤寛子¹, 小田朋宏², 中小路久美代³, 大野公一⁴

(1. 国立情報学研究所, 2. 株式会社 SRA, 3. 京都大学 学際融合教育研究推進センター,
4. 量子化学探索研究所/東北大学)

GRRM (Global Reaction Route Map)は、超球面探索法によりポテンシャル曲面上の化学反応経路を自動的に探索する手法であり、理論的には原子の大きさの制限のない探索を行うことが可能である。GRRMの主機能の1つは、入力された組成式をもつ全ての可能な平衡構造、遷移構造、解離チャンネルを含む化学反応経路の探索：全面探索である。全面探索の結果には既知化合物・反応、未知化合物・反応、既知の反応機構、未知の反応機構等、化学反応や分子に関する豊富な情報が含まれている。我々は、これらの分子・化学反応情報を整理し、新しい分子や化学反応機構の発見や設計を行うための研究に着手した。

GRRM から得られる全面探索の結果は通常大量のデータを含むテキスト情報であるため、ここにどのような情報が含まれているのかを知る必要がある。そこでまず我々は、探索結果を可視化する機能の開発から開始することとした。今回は、可視化システムのデザインと最新の開発状況について報告するとともに、大量の分子・化学反応経路データからのデータマイニングのアイデアについて報告する。

The image shows a screenshot of the GRRM output, which is a text-based representation of reaction paths. It includes details such as the starting random structure, the final structure, and the energy values for various steps. The text is organized into columns and rows, with some lines indicating the start and end of different reaction paths.

GRRMの全面探索結果

