

# パーシステント・ホモロジーを用いた グローバル反応経路地図に対する記述子の開拓

(<sup>1</sup> 北大院理・<sup>2</sup> 北大 WPI-ICReDD・<sup>3</sup> 北大院総化・<sup>4</sup> 産総研・<sup>5</sup> 関大システム理工)

○小林 正人<sup>1,2</sup>・村山 武来<sup>3</sup>・青木 雅允<sup>1</sup>・石橋 卓<sup>1</sup>・  
齋藤 琢弥<sup>1</sup>・中村 壮伸<sup>4</sup>・寺本 央<sup>5</sup>・武次 徹也<sup>1,2</sup>

k-masato@sci.hokudai.ac.jp

系に含まれる原子の種類と数からグローバル反応経路地図を自動的に構築することが、GRRM プログラムなどにより可能となってきた。GRRM は、試行錯誤の要素が大きかった反応探索を効率的に自動化し、計算化学分野にある種の革命をもたらした。しかし、GRRM が提供する膨大なグローバル反応経路地図を全て有効活用した研究はこれまで展開されてきただろうか？反応経路地図には、 $3N-6$  次元という巨大なポテンシャルエネルギー超曲面の中で最も深い意味を持つ極小点・一次鞍点の構造・エネルギーとそれらの接続情報が全て含まれている。このネットワーク情報から特徴量を抽出し、反応系自身を俯瞰的に特徴づける記述子として利用すれば、組成の異なる反応系同士を横断的に比較するような反応経路地図の高次元的な接続が可能になると考えられる。

そこで我々は、「穴」に着目したトポロジカルデータ解析の手法であるパーシステント・ホモロジー (PH) を用いて反応経路地図から地図自身を特徴づける記述子を獲得する手法を開発した。具体的にはまず、反応経路地図を頂点と辺にエネルギーがタグ付けされたグラフとして表す。辺の実数タグに基づき、グラフ構造から単体複体を順次生成するフィルトレーションは Petri らにより提案されている[1]。本研究では、これを頂点にも拡張し、生成する穴の次元に制約を加えるスケルトン・フィルトレーションを併用することにより、反応経路地図の解析に適したフィルトレーションを開発した。GRRM プログラムのアウトプットを参照し、PH 計算ソフトウェア HomCloud [2] を使用して上記の手続きに基づくパーシステント図 (PD) を出力するプログラムを作成した。

まずは対象として、GRRM-GDSP [3] に登録されている有機化合物  $\text{H}_2\text{C}_2\text{N}_2$  と  $\text{HC}_2\text{NO}_2$  の反応経路地図に適用した (図 1)。構成元素数の増加により PD の複雑化が確認できる。ほかに、5 原子からなる貨幣金属クラスターの反応経路地図などにも適用している。

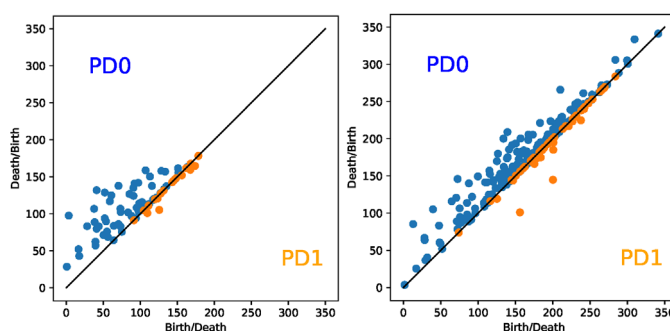


図 1. (左)  $\text{H}_2\text{C}_2\text{N}_2$  と (右)  $\text{HC}_2\text{NO}_2$  の GRRM に対する PD

[1] G. Petri, M. Scalamiero, I. Donato, and F. Vaccarino, *PLOS ONE* **8**, e66506 (2013).

[2] <https://homcloud.dev/> [3] [https://iqce.jp/SRPS/GRRM-GDSP\\_DEMO\\_e\\_new.HTM](https://iqce.jp/SRPS/GRRM-GDSP_DEMO_e_new.HTM)