(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2024年2月22日(22.02.2024)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2024/038864 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 20/10 (2019.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2023/029556

(22) 国際出願日： 2023年8月16日(16.08.2023)

(25) 国際出願の言語： 日本語

(26) 国際公開の言語： 日本語

(30) 優先権データ：
特願 2022-130179 2022年8月17日(17.08.2022) JP

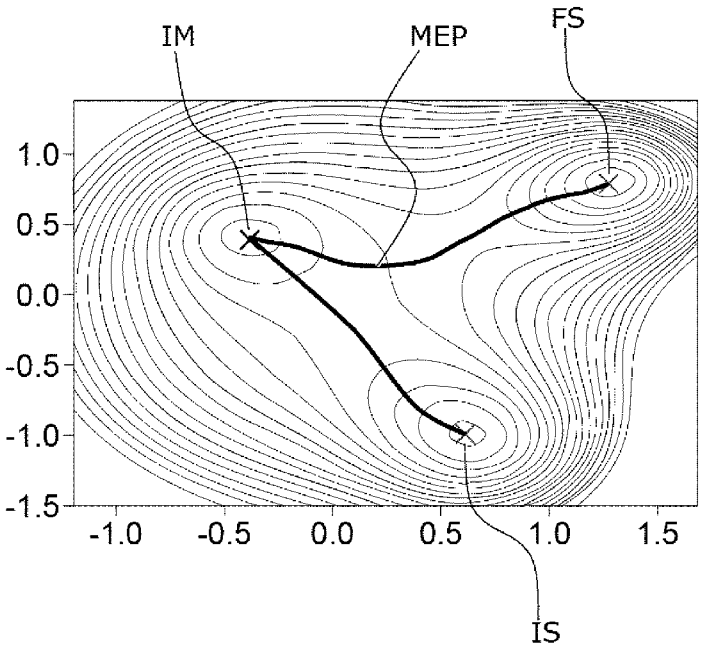
(71) 出願人: 株式会社 Ｐｒｅｆｅｒｒｅｄ Ｎｅｔｗｏｒｋｓ (**PREFERRED NETWORKS, INC.**) [JP/JP]; 〒1000004 東京都千代田区大手町１丁目６番１号 大手町ビル Tokyo (JP). ＥＮＥＯＳ株式会社 (**ENEOS CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目１番２号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 林 亮秀 (**HAYASHI Akihide**); 〒1000004 東京都千代田区大手町１丁目６番１号 大手町ビル 株式会社Ｐｒｅｆｅｒｒｅｄ Ｎｅｔｗｏｒｋｓ内 Tokyo (JP). 松本 皓太 (**MATSUMOTO Kota**); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目１番２号 ＥＮＥＯＳ株式会社内 Tokyo (JP). 矢山 由洋 (**YAYAMA Yoshihiro**); 〒1008162 東京都千代田区大手町一丁目１番２号 ＥＮＥＯＳ株式会社内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 反町 洋, 外 (**SORIMACHI Hiroshi** et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内１丁

(54) **Title:** INFORMATION PROCESSING DEVICE, INFORMATION PROCESSING METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称： 情報処理装置、情報処理方法、及びプログラム



(57) **Abstract:** [Problem] To search for a highly accurate reaction route. [Solution] This information processing device comprises: one or more memories; and one or more processors. The one or more processors acquire a route for connection from a start state to an end state, divide the route on the basis of local minimum points in the route, and optimize the divided routes, to acquire a reaction path from the start state to the end state.

(57) 要約： ［課題］精度の高い反応経路を探索する。 ［解決手段］情報処理装置は、１又は複数のメモリと、１又は複数のプロセッサと、を備える。前記１又は複数のプロセッサは、始状態から終状態を接続する経路を取得し、前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、前記分割された経路を最適化することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する。

WO 2024/038864 A1

［続葉有］

目６番６号 日本生命丸の内ビル 協和特許法律事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

一 国際調査報告（条約第21条(3)）

明　細　書

発明の名称 ： 情報処理装置、情報処理方法、及びプログラム

技術分野

[0001]　本開示は、情報処理装置、情報処理方法、及びプログラムに関する。

背景技術

[0002]　分子の反応における既知の始状態と終状態とを接続する経路の中で最もエネルギーの低い経路を求め、分子の反応経路を探索することがある。 NEB (Nudged Elastic Band) 、 String といった手法があるが、収束性や速度において課題が残る。

[0003]　また、 NEB 、 String 等による反応経路の探索を、 Dimer 法、 Sella 、 CNEB (Climbing NEB) 等の手法及び IRC (Intrinsic Reaction Coordinate) と組み合わせることにより、反応経路探索の精度を向上することができるが、極所解があると NEB がうまく動作しない、パラメータのチューニングがセンシティブである、また、経路中において最もエネルギーが高くなる遷移状態を取得しても IRC における最適化がうまくいくとは限らない、といった問題から、これらの手法を組み合わせて自動的に反応経路探索を実現することは困難である。

先行技術文献

非特許文献

[0004] 非特許文献1：M. Jafari, et.al., “Reliable and Efficient Reaction Path and Transition State Finding for Surface Reactions with the Growing String Method”, Journal of Computational Chemistry, 2017, 38, 645-658, https://deepblue.lib.umich.edu/biFStream/handle/2027.42/136310/jcc24720.pdf?sequence=2

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0005]　本開示は、精度の高い反応経路を探索する情報処理装置を提案する。

課題を解決するための手段

[0006] 一実施形態によれば、情報処理装置は、 1 又は複数のメモリと、 1 又は複数のプロセッサと、を備える。前記 1 又は複数のプロセッサは、始状態から終状態を接続する経路を取得し、前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、前記分割された経路を最適化することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する。

[0007] 一実施形態によれば、情報処理装置は、 1 又は複数のメモリと、 1 又は複数のプロセッサと、を備える。前記 1 又は複数のプロセッサは、始状態から終状態までを接続する経路を取得し、前記経路に基づく最適化を実行することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する。前記 1 又は複数のプロセッサは、前記最適化において、前記経路に基づいて、エネルギーの極大点を探索し、前記極大点から所定範囲における補間の間隔を、他の点から所定範囲における補間の間隔より小さくする。

図面の簡単な説明

[0008] [図1]化学反応におけるエネルギー分布の一例を示す図。

[図2]化学反応経路探索の一例を示す図。

[図3]化学反応経路探索の一例を示す図。

[図4]化学反応経路探索の一例を示す図。

[図5]化学反応経路探索の一例を示す図。

[図6]一実施形態に係る化学反応経路探索の処理の一例を示すフローチャート。

[図7]一実施形態に係る経路における極小点を示す図。

[図8]一実施形態に係る経路における String の最適化を示す図。

[図9]一実施形態に係る遷移状態の探索の処理を示すフローチャート。

[図10]一実施形態に係る遷移状態の探索の処理の一過程を示す図。

[図11]一実施形態に係る経路探索の処理の一過程を示す図。

[図12]一実施形態に係る経路探索の一例を示す図。

[図13]一実施形態に係る経路探索の処理の一過程を示す図。

[図14]一実施形態に係る情報処理装置のハードウェア実装例を示す図。

発明を実施するための形態

[0009] 以下、図面を参照して本発明の実施形態について説明する。図面及び実施形態の説明は一例として示すものであり、本発明を限定するものではない。

[0010] まず、化学反応における経路探索について簡単に説明する。

[0011] 図1は、化学反応におけるエネルギー分布の一例を示す図である。図において、エネルギー分布は、等高線で示されている。この図1では、外側に行くほど内部エネルギーが高い状態、内側に行くほど低い状態を示している。この図においては、 2 次元で示されているが、エネルギー分布が表現される空間は、一般的により高次元の空間として表現される。

[0012] なお、各次元（軸）には、空間における座標情報を示す次元（軸）が含まれていてもよい。また、各次元（軸）は、反応座標を示してもよい。

[0013] 化学反応経路探索は、始状態と終状態が既知である、又は、望ましい始状態と終状態を設定することで、どのような化学反応の経路を介して始状態から終状態へと遷移するかを探索することを目的とする。例えば、図中の IS（Initial State） が始状態の位置を示し、 FS（Final State）が終状態の位置を示す。このように、安定した始状態 IS と終状態 FS は、一般的にエネルギーが低い位置となる。この始状態 IS から終状態 FS へと至る経路を探索するのが、化学反応経路探索である。

[0014] 適切な経路は、例えば、等高線を横切る実線で示される、始状態 IS と終状態 FS を接続する経路のなかで最もエネルギーの低い経路である。化学反応経路探索は、この最もエネルギーの低い経路（MEP : Minimum Energy Path）を種々の手法により探索する。

[0015] 分子の座標は、 3N（Nは分子を構成する原子の数）次元の空間で表現され、人間が感知することが困難である。このため、反応経路探索の手法は、 2 次元のポテンシャルを用いて研究されている。分子の状態間の接続をバネで表現する手法として、 EB（Elastic Band）を用いた手法がある。この手法は、 Primitive-EB 、 NEB（Nudged Elastic Band）等に発展することができる

。

[0016] 化学反応経路探索を実行する情報処理装置は、例えば、 1 又は複数のメモリと、 1 又は複数のプロセッサと、を備える。以下の処理は、プロセッサが必要な情報をメモリから取得して実行されてもよい。ソフトウェアによる情報処理が、プロセッサを用いて具体的に実現される態様であってもよい。

[0017] 図2は、化学反応経路探索の一例を示す図である。プロセッサは、例えば、始状態と終状態を線形に接続し、接続した線分上にいくつかのイメージを設定する。イメージは、経路上の一点を示す情報である。

[0018] EB 、 Primitive-EB の手法は、イメージ同士をバネで接続し、それぞれのイメージを接続するバネのエネルギーを演算し、このバネのエネルギーの和を最小化する問題に帰着することで、 MEP を求める手法である。この手法では、バネ定数により解が適切に最適化できず、例えば、バネ定数が強すぎる場合には、バネに由来する力（Spring Force）の影響により直線に近い経路に収束し、逆にバネ定数が弱すぎる場合には、エネルギー分布の力（True Force）の影響により多くのイメージが安定点（例えば、始状態 IS 又は 終状態 FS）に落ち込んでしまい経路における最もエネルギーの高い点である遷移状態 TS（Transition State）の付近のイメージが疎になるという課題がある。

[0019] これに対応するべく、 NEB においては、情報処理装置は、 Spring Force のイメージ同士を接続するバンドに平行な成分を用いることで直線に近づくことを回避し、 True Force のバンドに垂直な成分を用いることで、イメージが安定構造に陥らずに等間隔に並ぶように制御する。

[0020] それぞれのイメージにおいて、バンドに平行な方向の単位ベクトルを定義することで、上記の Spring Force 及び True Force を表現することができる。この単位ベクトルの方向として、エネルギーの分布における頂上側のバネの向きの単位ベクトルを採用することで、性能が上がりやすいことが知られている。この定義の手法を、 Improved Tangent Estimation と呼ぶ。

[0021] NEB をさらに改良し、イメージと遷移状態とを近づけて遷移状態における

エネルギーを取得する手法が、 CI-NEB (Climbing Image Nudged Elastic Band) である。この CI-NEB では、頂点のイメージに対してのみ、 True Force のバンド平行成分を反転させる。これにより、頂点のイメージは、バンドの中を登っていくようになる。この結果、適切な遷移状態にバンド（頂点）を近づけることが可能となり、より精度の高い経路を探索することができる。

[0022] 一方で、バンドによじれが発生した場合に、 NEB の手法では、 Spring Force の垂直成分を考慮しないため、このよじれが最適化を進めても解消しない結果となる。このようなよじれは、偽の遷移状態を発生させたり、真の遷移状態を隠蔽させたりする。

[0023] そこで、 EB の手法において、 Spring Force のバンドに垂直な方向の力を考慮し、かつ、 True Force のバンドに平行な方向の成分を考慮しない処理をすることが考えられる。この手法によれば、バネ定数を小さくした場合においても、 True Force のバンドに平行な成分が 0 であるので、安定点にイメージの多くが収束することを回避することができる。

[0024] EB を使用しない方法として、 String を用いる手法がある。 String は、始状態 IS 及び終状態 FS における任意の長さを有する経路で表される。 Growing String 法は、始状態 IS 及び 終状態 FS から等間隔にイメージを補間しながら String を最適化する手法である。

[0025] 図3から図5は、 Growing String 法を用いた場合におけるイメージの補間の様子の一例を示す図である。これらの図に示すように、始状態 IS 及び終状態 FS からそれぞれイメージを補間していくことで String を成長させ、徐々に遷移状態 TS や中間状態 IM を含む経路に近づいて行くことができる。なお、中間状態 IM は、始状態 IS から終状態 FS までの経路に存在する局所安定点であってもよい。

[0026] しかしながら、この String は、座標変換が複雑である。この結果、分子を構成する原子の数が増えたり、分子の経路が複雑であったりする場合には、実時間内での経路の取得が困難である。

[0027] また別の手法として、 IRC がある。 IRC は、遷移状態 TS を取得した後

に、遷移状態 TS から始状態 IS 及び終状態 FS へと向かって最急降下法により MEP を取得する手法である。より具体的には、遷移状態 TS を負の固有ベクトル方向に微小位置ずらし、この点から最急降下法を用いる。理想的な遷移状態 TS は、鞍点であるため、微小位置ずらしてから最急降下法を用いる。

[0028] この手法は、遷移状態 TS が適切に求められることにより精度のよい結果を取得することができるが、遷移状態 TS が適切に抽出できていない場合には、処理が終了しない蓋然性がある。例えば、 MEP において極大点が 2 箇所以上あるにも拘わらず、 1 箇所の極大点しか抽出できないような場合には、探索が終了しない蓋然性が高くなる。

[0029] 上記の手法は、例えば、ユーザが注意深くパラメータを設定することで MEP を適切に取得できるが、自動化することは、困難である。本開示おいては、これらの手法を適切に用いることで、計算コスト、時間コストを小さくする一方で、精度のよい経路探索をすることができる。

[0030] 図6は、一実施形態に係る情報処理装置における化学反応経路探索の処理の一例を示すフローチャートである。なお、以下に説明する任意のステップにおいて、エネルギー等の物性値に関する計算が必要である場合、当該ステップの前後に、若しくは、並行し、又は、当該ステップ内において、該当する状態について NNP (Neural Network Potential) 等を用いてエネルギー等の物性値に関する計算を実行するステップを備えていてもよい。

[0031] また、一般的に始状態 IS と終状態 FS を区別する必要は無い。このため、以下においては、始状態 IS と終状態 FS を区別して説明しているが、適宜これらは入れ替えて処理することができる。また、情報処理装置は、始状態 IS 又は終状態 FS のいずれか一方において実行していると説明されている処理については、その双方から実行することも可能であることに留意されたい。

[0032] 情報処理装置は、まず、始状態 IS から終状態 FS を接続する経路を所定の手法により取得する (S100) 。この手法は、例えば、 NEB 、 OM-NEB (arX

iv:2106.06275, https://arxiv.org/abs/2106.06275v2)、 EB 、 String 、 Growing String 法、 Simplified String を用いた手法、又は、上記に説明した Improved Tangent String の手法であってもよい。情報処理装置は、本処理として、始状態 IS から終状態 FS への経路を最適化する手法、又は、2 つの極小点の間における MEP を推定する手法を用いることができる。

[0033] 本段階においては、情報処理装置は、精密な経路の探索を実行するのではなく、おおまかな経路の取得を実行してもよい。情報処理装置は、例えば、種々の探索手法における反復回数や誤差関数の値と所定値とを比較して終了条件を設定してもよい。

[0034] S106 の処理から S100 の処理へと遷移する場合には、始状態 IS 及び終状態 FS を参照するのではなく、分割されたそれぞれの経路において、短い距離におけるより精度の高い経路の取得を実行する。この場合、分割された経路の両端から、経路の取得を実行してもよい。

[0035] 情報処理装置は、取得した経路において、極小点が存在するか否かを判定する（S102）。なお、ここで、極小点は、経路における両端を除くいずれかの点（イメージ）である。以下、 S110 の処理を含め、極小点は、端点を除く経路上のイメージから選択、抽出される点のことを示す。極小点は、例えば、始状態 IS から終状態 FS までの経路において、エネルギーがローカルミニマムになる点であってもよく、経路上に複数個存在していてもよい。なお、 S104 等のステップにより新たな経路の端点となる極小点は、説明の簡単のため、文言を改めずに極小点と称することがある。

[0036] 極小点が存在する場合（S102 ： YES）、情報処理装置は、当該極小点で経路を分割する（S104）。極小点が複数ある場合には、情報処理装置は、それぞれの極小点において経路を分割する。以下の処理は、複数の分割された経路のそれぞれについてパラレルに実行されてもよいし、シーケンシャルに実行されてもよい。

[0037] 図7は、 S100 により取得された経路と、極小点の一例を示す図である。この図に示す点 LM が極小点である。情報処理装置は、極小点の存在を確認す

ると、この極小点 LM において、経路を分割する（S104）。図では、極小点が 1 つの場合を示しているが、これに限定されるものではなく、極小点が 2 つ以上存在する場合には、それぞれの極小点で分割する。

[0038] 分割された経路は、例えば、始状態 IS から極小点 LM までの経路と、極小点 LM から終状態 FS までの経路の 2 つの経路となる。情報処理装置は、これらの 2 つの経路をそれぞれ新たな経路として経路情報を更新する。

[0039] 情報処理装置は、必要に応じて、この新たな経路を最適化し、 S102 と S104 の処理を反復してもよい。この反復処理は、全ての経路において極小点が存在しなくなるまで実行されてもよい。

[0040] 限定されない一例として、 S108 の処理をまだ実行していない場合には（S106: NO）、情報処理装置は、分割された経路のそれぞれについて、 S100 からの処理を繰り返す。一方で、 S108 の処理をすでに実行済みである場合には（S106: YES）、情報処理装置は、分割された経路のそれぞれについて、 S108 からの処理を実行してもよい。

[0041] 限定されない一例として、 S104 において分割したそれぞれの経路における最適化処理を実行してもよい。この場合、 S106 の処理の後は、点線の矢印で示されるように、 S102 の処理からを繰り返してもよい。

[0042] 情報処理装置は、この限定されない一例である最適化処理として、分割されたそれぞれの経路の String に基づいて、所定の手法で仮の遷移状態 TS を取得することでこの最適化処理を実行してもよい。仮の遷移状態 TS を取得する場合には、情報処理装置は、 String の両端及び遷移状態 TS を通るように、例えば、両端から Growing String 法の手法を用いることで実行してもよい。この Growing String 法の手法は、 improved tangent を組み合わせて実行してもよい。なお、 String に沿った極小点は、実際の極小点とし、全ての極大点は、仮の遷移状態 TS とすることができる。

[0043] 図8は、一実施形態に係る極小点 LM と終状態 FS との間の String を Growing String 法の手法に基づいて最適化した結果の一例を示す図である。この図に示すように、分割した経路において、最適化が実行されることで、中

間状態 IM に近い状態から終状態 FS への経路を探索することができる。

[0044] 情報処理装置は、同様に、始状態 IS と極小点 LM の経路の最適化処理を実行してもよい。

[0045] 次に、情報処理装置は、それぞれの経路における遷移状態 TS を取得する(S108)。情報処理装置は、所定の手法を用いて経路における遷移状態 TS を探索することができる。

[0046] 図9は、限定されない一例としての経路における遷移状態の探索の処理を示す図である。

[0047] 情報処理装置は、最適化された String において、 Climbing String 法を用いることで、遷移状態の近傍を探索する（S200）。ここで、 Climbing String 法とは、「経路における高エネルギーの領域において他の領域よりイメージを多く定義し、このイメージが多く定義された領域において、遷移状態 TS の近傍である点かつ経路に沿ってエネルギーが最高である点を決定する手法」、「経路の補間線に沿ってエネルギーが最大となる点を探索し、得られたエネルギー最大の点と少なくとも始状態又は終状態 FSのいずれか１つとの間で補間を行うことで、遷移状態 TSの近傍である点かつ経路に沿ってエネルギーが最高である点を決定する手法」、又は、「上記２つの手法を組み合わせた手法」、のいずれか１つを含む手法である。また、遷移状態の近傍とは、少なくとも、First order saddle point探索手法を実行すると遷移状態TSに収束すること、又は、遷移状態TSからの距離が所定の閾値以下であることいずれかを満たす領域であってもよい。

[0048] 例えば、情報処理装置は、 String の補間経路に沿って最大エネルギーの点を探索し、最大エネルギーの点と始状態 IS 及び／又は終状態 FS の間を補間することで遷移状態 TS の近傍の点を決定してもよい。この場合、情報処理装置は、最大エネルギーの点の近くで補間の間隔を他の部分より小さくすることでより精度の高い遷移状態 TS の近傍の点を決定することができる。情報処理装置は、一例として、最大エネルギーの点から始状態 IS及び／又は終状態 FS に向かって補間する際、所定の数については短い補間間隔で補

間することで、最大エネルギーの点の近くを密に補間してもよい。

[0049] 情報処理装置は、例えば、図10のような終状態 FS と極小点 LM との間の遷移状態 TS の近傍の点を探索する場合には、経路における最大エネルギーの点を抽出し、この最大エネルギーの点付近で補間の間隔を他の部分より小さくすることで、終状態 FS と極小点 LM とを接続する経路における遷移状態 TS の近傍の点に関する情報を、高い精度で取得することができる。

[0050] 情報処理装置は、さらに、 String に沿って定義されているイメージのうち、高エネルギーのイメージを抽出し、このイメージから出発して、高エネルギーの方向を探索することで、より遷移状態 TS に近い点を取得してもよい。このように、情報処理装置は、 CI-NEB の処理におけるフォースを反転すること無く、遷移状態 TS の近傍を取得することができる。

[0051] なお、情報処理装置は、この S200 の処理を、経路の中で最もエネルギーが高いイメージが遷移状態 TS に収束し、かつ、収束前においても遷移状態 TS よりもエネルギーが高いことが保証される手法に置き換えて実行することもできる。情報処理装置は、例えば、 NEB 、 CI-NEB 、 OM-NEB 、 EB 又はこれらの組み合わせの手法を用いてもよい。

[0052] 情報処理装置は、 Climbing String 法におけるエネルギーが収束したか否か、又は、勾配が所定値（例えば、所定の微小値）よりも小さくなったか否かを判定する（S202）。情報処理装置は、収束していないか、平坦ではない場合（S202 ： NO）には、 S200 の処理を繰り返す。

[0053] なお、平坦であるとは、いくつかの例として、上記の勾配が所定値よりも小さくなったことのほか、所定ステップの間に Force も Energy も小さくならない、又は、小さくなる幅若しくは変動幅が所定値（例えば、所定の微小値）以下である場合を示してもよい。

[0054] 条件を満たした場合（S202 ： YES）、情報処理装置は、 S200 において取得した遷移状態 TS の近傍の点（一例として、 Initial Guess）を用いて、 Dimer 法を実行することで、遷移状態 TS を探索する（S204）。情報処理装置は、 S202 の処理については、 Optimization to a first order saddle p

oint (ChemRxiv “Sella, an open-source automation-friendly molecular saddle point optimizer,” https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/62e05c03ed926ea4b1a73e2c) 等の手法を用いてもよい。例えば、情報処理装置は、 Sella 法を用いて遷移状態 TS を探索してもよい。

[0055] Dimer 法において、解が収束した場合（S206 ： YES）、情報処理装置は、収束した点を遷移状態 TS を示す点として取得する（S208）。

[0056] 一方で、 Dimer 法において、解が発散した場合（S206 ： NO）、情報処理装置は、 S200 からの処理を繰り返す。

[0057] なお、発散条件は、例えば、 Dimer 法のエネルギーが経路の最大イメージのエネルギーを超えることと定義してもよい。また、情報処理装置は、 S200 で取得したエネルギーに基づいて、 S206 における発散の判定をしてもよい。別の例として、発散条件は、 Dimer 法のエネルギーが経路の 2 番目に高いエネルギーより低くなることと定義してもよい。別の例として、発散条件は、 Dimer 法の座標が経路の最大イメージから遠くなることと定義してもよい。また、発散条件として、上記のいずれか複数の組み合わせを用いてもよいし、上記のいずれかの条件を満たした場合に発散したと判定してもよい。

[0058] また、情報処理装置は、 S204 の処理において Dimer 法とは別の手法を用いて遷移状態 TS を探索してもよい。この場合、 S204 における発散条件は、用いている手法により取得されるエネルギーが（例えば、分割された後の 1 つの）経路において設定した点におけるエネルギー（例えば、 Climbing String 法で取得された最大エネルギー）を超えることと定義してもよいし、経路上の点における 2 番目に高いエネルギーより低くなることと定義してもよいし、若しくは、座標が経路上の最大エネルギーを示す点から遠くなることと定義してもよいし、又は、これらの組み合わせとして定義してもよい。

[0059] 上記においては、 S200 の Climbing String 法を用いる処理においては、経路上に存在する全てのイメージを用いた例を説明したが、これに限定されるものではない。

[0060] 図11は、 Climbing String 法を用いる別の例を示す経路探索の一過程を示

す図である。情報処理装置は、例えば、この図11に点線で示される範囲内のイメージを用いて、 Climbing String 法の精度を向上させてもよい。

[0061] 具体的には、情報処理装置は、最大エネルギーを示すイメージ付近のイメージにおいて、 Climbing String 法を実行してもよい。最大エネルギー付近のイメージに限定して最適化を実行することで、 Force を評価する回数を削減することが可能となる。

[0062] この一部のイメージを用いて Climbing String 法を実行するステップと、経路上（又は分割された経路上）の全てのイメージを用いて Climbing String 法を実行するステップと、を組み合わせて処理することで、最大エネルギー付近のイメージをより精度よく探索することが可能となり、この結果、最大エネルギーを示すイメージから遷移状態を探索するコストを削減することもできる。

[0063] なお、一部の点を用いる場合には、情報処理装置は、例えば、所定エネルギーよりも大きいエネルギーを示すイメージを用いてもよい。別の例として、情報処理装置は、経路（又は分割された経路）において極小点のエネルギーを示すイメージが存在する場合には、この極小点のイメージよりも最大エネルギーのイメージに近いイメージを用いてもよい。情報処理装置は、これらを組み合わせてイメージを抽出して用いてもよい。

[0064] Dimer 法だけを用いる場合、フォースの反転を伴うため、発散し、解が見つからない場合があるが、発散した場合には、 Climbing String 法の実行条件（例えば、収束条件等）を変更して実行することで、異なる近傍の点（より遷移状態 TS に近い点）を抽出できる。このため、Climbing String 法において、遷移状態 TS の近傍を取得することで Dimer 法において精度よく遷移状態 TS を取得することが可能となる。なお、 Climbing String 法は、他の方法で実行されてもよい。

[0065] 図6に戻り、情報処理装置は、 S108 の処理において新たな極小点が検出されているか否かを判定する（S110）。新たな極小点が検出されている場合 （S110: YES） には、 S104 の処理に戻り、処理を繰り返す。

[0066] 情報処理装置は、 S108 の処理において新たな極小点が検出されていない場合（S110: NO）、情報処理装置は、例えば、極小点 LM と終状態 FS との間において取得された遷移状態 TS と、始状態 IS とを接続する経路を探索する（S112）。情報処理装置は、 Growing String 法、線形補間、 IDPP 補間等の経路全体を最適化する手法の組み合わせにより、この処理を実行してもよい。情報処理装置は、例えば、Growing String 法の手法を用いることで、 S112 の処理を擬似的な IRC 処理として実行してもよい。

[0067] 図12は、一実施形態に係る遷移状態 TS と始状態 IS との間の経路を探索する一例を示す図である。この図に示されるように、情報処理装置は、取得した遷移状態 TS と、始状態 IS とを両端として、次の経路探索を実行する。この探索は、 S100 の経路の探索と同様に種々の手法を用いて実行してもよい。

[0068] S112 の別の処理例として、情報処理装置は、遷移状態 TS と、すでに抽出された経路の情報（例えば、S108で取得された経路の情報）から、遷移状態 TS を通る最適な経路を取得してもよい。情報処理装置は、例えば、すでに抽出されている経路のうち、最も高いエネルギーのイメージを遷移状態 TS で置き換え、最も遷移状態 TS に近いイメージを遷移状態 TS の座標で固定した String 法等の経路全体を最適化する手法を実行することで、経路の探索を実行してもよい。

[0069] なお、情報処理装置は、 S112において、遷移状態 TS と終状態 FS の間の経路、又は、遷移状態 TS と分割された経路の端点の間の経路を探索してもよい。

[0070] なお、本明細書において、「近い」、「遠い」等の距離の定義の一例として、

max（norm（原子の移動距離））

を用いることもできる。原子の移動は、ベクトルで示され、 norm（原子の移動距離）は、原子の移動した距離を示す。すなわち、距離の定義の一例として、複数の原子の移動距離の絶対値のうちで最大の値を用いて判断してもよ

い。

[0071] 次に、情報処理装置は、 S112 で探索された経路において、新たに極小点が存在しているかを判定する（S114）。

[0072] 探索した経路において両端以外に極小値が存在する場合（S114: YES）、情報処理装置は、 S104 からの処理を反復し、極小値がなくなるまで、経路の分割と、遷移状態からの経路の探索とを実行する。

[0073] 探索した経路において両端以外に極小値が存在しない場合（S114: NO）、情報処理装置は、取得された複数の分割された経路を接続、又は、適切に合成することで MEP を取得する（S116）。

[0074] 図13は、ループができた場合の処理の一例の一過程を示す図である。上記のように経路探索を行う過程として、経路にループが発生する可能性がある。ループが発生する場合、適切な経路を探索することが困難である。

[0075] なお、情報処理装置は、経路に沿った道のりが、イメージ同士の距離よりも有意に長いことを判定してループが発生していることを検出してもよい。例えば、情報処理装置は、全ての経路に沿った極小点同士を抽出し、その中の 2 点間において距離が近いもの同士をループ候補として抽出してもよい。さらに、情報処理装置は、これらの極小点同士の距離と、経路に沿った道のりとを比較することで、ループ候補を限定してもよい。

[0076] 図13においては、探索された経路を点線で示している。探索された経路は、始状態 IS から中間状態 IM を経由し、極小点 LM1 まで到達した後に、下側に存在するループを経由して、極小点 LM2（終状態 FS でもよい）へと接続される。このようなループがある場合、ループ中にある極小点 LM1 、 LM2 を接続する String を定義した上で、経路上のイメージにおける最高エネルギーが最小となるような経路を探索する。これにより、情報処理装置は、経路に含まれるループを解消することができる。

[0077] この手法は、経路におけるイメージに対してダイクストラ法と類似したアルゴリズムを用いることに該当する。一例として、情報処理装置は、経路の最大エネルギーの指数関数の和を最小にするようにダイクストラ法を用いて

もよい。

[0078] 情報処理装置は、例えば、極小点 LM1 と LM2 とを線形補間（図13の太い実線）し、この線形補間した状態から Climbing String 法を実行することで、適切な経路を取得することが可能となる。なお、情報処理装置は、 IDPP 補間、 Growing String 法等の手法を用いてこの処理を実行することもできる。情報処理装置は、図6における S104 の実行後、 S116 の実行後など、所定のタイミングで上記ループを解消する処理を実行してもよい。

[0079] 以上のように、本実施形態によれば、 Climbing String 法と Dimer 法とを適切に用いることで、探索対象の経路において、複数の極大点が存在する場合や反応経路における地形が険しい場合においても、適切な経路を取得することができる。また、従来手法と比較して、探索に要する時間を削減することができる。また、上記の処理は、ユーザによる精密なパラメータチューニングをすることなく、情報処理装置において自動的に精度の高い反応経路を探索することができる。

[0080] 本開示における情報処理装置は、限定されない一例として、以下のようにまとめることができる。

[0081] 限定されない例としての一実施形態によれば、情報処理装置は、 1 又は複数のメモリと、 1 又は複数のプロセッサと、を備え、プロセッサは、始状態 IS から終状態 FS を接続する経路を取得し、この経路における両端以外の極小点 LS 基づいて経路を分割し、分割された経路を最適化し、最適化処理の結果に基づいて、始状態 IS から終状態 FS までの反応経路を取得する。

[0082] 図6に示す S108 の処理が、分割された経路の最適化処理の限定されない一例としての処理であってもよい。一方で、上記の情報処理において、図6の S108 の処理を用いずに、分割された経路の最適化処理を実行することも可能である。本開示の実施形態における経路の最適化処理は、最適化前の経路情報に基づいて新たな経路情報を取得する処理であってもよい。

[0083] 上記の情報処理装置において、プロセッサは、少なくとも NEB 法、 OM-NEB 法、 EB 法、 String 法、 Growing String 法、 Simplified String 法、

Improved Tangent String 法のいずれか 1 つの手法を用いて、経路を取得してもよい。

[0084] 上記の情報処理装置において、プロセッサは、分割された経路に基づいて、遷移状態を取得し、取得した遷移状態に基づいて、反応経路を取得してもよい。

[0085] 上記のいずれかの情報処理装置において、プロセッサは、分割された経路、又は、反応経路における 2 つの極小点の間の距離に基づいてループを検出し、これら 2 つの極小点を接続する経路を探索することで、ループを解消する処理を実行してもよい。

[0086] 限定されない例としての一実施形態によれば、情報処理装置は、 1 又は複数のメモリと、 1 又は複数のプロセッサと、を備え、プロセッサは、経路に基づいて Climbing String 法を実行することで遷移状態を探索し、この探索結果に基づく Dimer 法を実行することで遷移状態を取得する。

[0087] 上記の情報処理において、経路を分割することは、必須の構成ではない。経路を分割しない場合、経路とは、（1）所定の手法で取得した経路、（2）経路の Initial Guess（初期の経路の全体的な概略を取得する推定結果）、又は、（3）両端点を線形的に（例えば、直線で）接続したもの、のうちいずれか 1 つであってもよいし、これらとは別の経路であってもよい。

[0088] 上記の情報処理装置において、 Climbing String 法は、高エネルギー領域において他の領域よりイメージを多く定義して遷移状態を探索する手法、経路の補間線に沿って取得されたエネルギーが最大となる点と端点との間で補間を行うことで遷移状態を探索する手法、又は、これらの組み合わせのいずれか 1 つを用いる手法であってもよい。

[0089] 上記のいずれかの情報処理装置において、プロセッサは、取得した遷移状態を用いて、始状態 IS から終状態 FS までの反応経路を取得してもよい。

[0090] 上記のいずれかの情報処理装置において、プロセッサは、 Climbing String 法で取得した経路情報を利用して、反応経路を取得してもよい。

[0091] 上記のいずれかの情報処理装置において、プロセッサは、始状態 IS から

終状態FS を接続する経路を取得し、この経路の両端以外の極小点に基づいて経路を分割してもよく、遷移状態の探索は、この分割された経路に基づいて実行されてもよい。

[0092] 以上の実施形態において、「分割された経路に基づいて」とは、（1）分割された経路をそのまま用いて、処理を続ける場合、及び、（2）分割された経路を最適化したものを用いて、処理を続ける場合、の双方の意味を含む概念である。

[0093] 前述した実施形態における各装置(情報処理装置)の一部又は全部は、ハードウェアで構成されていてもよいし、 CPU（Central Processing Unit）又は GPU（Graphics Processing Unit）等が実行するソフトウェア（プログラム）の情報処理で構成されてもよい。ソフトウェアの情報処理で構成される場合には、前述した実施形態における各装置の少なくとも一部の機能を実現するソフトウェアを、 CD-ROM（Compact Disc-Read Only Memory）、 USB（Universal Serial Bus）メモリ等の非一時的な記憶媒体（非一時的なコンピュータ可読媒体）に収納し、コンピュータに読み込ませることにより、ソフトウェアの情報処理を実行してもよい。また、通信ネットワークを介して当該ソフトウェアがダウンロードされてもよい。さらに、ソフトウェアの処理の全部又は一部が ASIC（Application Specific Integrated Circuit）又は FPGA（Field Programmable Gate Array）等の回路に実装されることにより、当該ソフトウェアによる情報処理がハードウェアにより実行されてもよい。

[0094] ソフトウェアを収納する記憶媒体は、光ディスク等の着脱可能なものでもよいし、ハードディスク又はメモリ等の固定型の記憶媒体であってもよい。また、記憶媒体は、コンピュータ内部に備えられてもよいし（主記憶装置または補助記憶装置等）、コンピュータ外部に備えられてもよい。

[0095] 図14は、前述した実施形態における各装置（情報処理装置）のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。各装置は、一例として、プロセッサ71と、主記憶装置72（メモリ）と、補助記憶装置73（メモリ）と、ネットワークインタフェース74と、デバイスインタフェース75と、を備え、これらがバ

ス76を介して接続されたコンピュータ7として実現されてもよい。

[0096] 図14のコンピュータ7は、各構成要素を一つ備えているが、同じ構成要素を複数備えていてもよい。また、図14では、1台のコンピュータ7が示されているが、ソフトウェアが複数台のコンピュータにインストールされて、当該複数台のコンピュータそれぞれがソフトウェアの同一の又は異なる一部の処理を実行してもよい。この場合、コンピュータそれぞれがネットワークインタフェース74等を介して通信して処理を実行する分散コンピューティングの形態であってもよい。つまり、前述した実施形態における各装置（情報処理装置）は、1又は複数の記憶装置に記憶された命令を1台又は複数台のコンピュータが実行することで機能を実現するシステムとして構成されてもよい。また、端末から送信された情報をクラウド上に設けられた1台又は複数台のコンピュータで処理し、この処理結果を端末に送信するような構成であってもよい。

[0097] 前述した実施形態における各装置（情報処理装置）の各種演算は、1又は複数のプロセッサを用いて、又は、ネットワークを介した複数台のコンピュータを用いて、並列処理で実行されてもよい。また、各種演算が、プロセッサ内に複数ある演算コアに振り分けられて、並列処理で実行されてもよい。また、本開示の処理、手段等の一部又は全部は、ネットワークを介してコンピュータ７と通信可能なクラウド上に設けられたプロセッサ及び記憶装置の少なくとも一方により実現されてもよい。このように、前述した実施形態における各装置は、１台又は複数台のコンピュータによる並列コンピューティングの形態であってもよい。

[0098] プロセッサ71は、少なくともコンピュータの制御又は演算のいずれかを行う電子回路（処理回路、 Processing circuit 、 Processing circuitry 、 CPU 、 GPU 、 FPGA 、 ASIC 等）であってもよい。また、プロセッサ71は、汎用プロセッサ、特定の演算を実行するために設計された専用の処理回路又は汎用プロセッサと専用の処理回路との両方を含む半導体装置等のいずれであってもよい。また、プロセッサ71は、光回路を含むものであってもよいし

、量子コンピューティングに基づく演算機能を含むものであってもよい。

[0099] プロセッサ71は、コンピュータ7の内部構成の各装置等から入力されたデータやソフトウェアに基づいて演算処理を行ってもよく、演算結果や制御信号を各装置等に出力してもよい。プロセッサ71は、コンピュータ7の OS（Operating System）や、アプリケーション等を実行することにより、コンピュータ７を構成する各構成要素を制御してもよい。

[0100] 前述した実施形態における各装置（情報処理装置）は、1又は複数のプロセッサ71により実現されてもよい。ここで、プロセッサ71は、1チップ上に配置された1又は複数の電子回路を指してもよいし、2つ以上のチップあるいは2つ以上のデバイス上に配置された1又は複数の電子回路を指してもよい。複数の電子回路を用いる場合、各電子回路は有線又は無線により通信してもよい。

[0101] 主記憶装置72は、プロセッサ71が実行する命令及び各種データ等を記憶してもよく、主記憶装置72に記憶された情報がプロセッサ71により読み出されてもよい。補助記憶装置73は、主記憶装置72以外の記憶装置である。なお、これらの記憶装置は、電子情報を格納可能な任意の電子部品を意味するものとし、半導体のメモリでもよい。半導体のメモリは、揮発性メモリ又は不揮発性メモリのいずれでもよい。前述した実施形態における各装置（情報処理装置）において各種データ等を保存するための記憶装置は、主記憶装置72又は補助記憶装置73により実現されてもよく、プロセッサ71に内蔵される内蔵メモリにより実現されてもよい。例えば、前述した実施形態における記憶部（メモリ）は、主記憶装置72又は補助記憶装置73により実現されてもよい。

[0102] 前述した実施形態における各装置（情報処理装置）が、少なくとも1つの記憶装置（メモリ）と、この少なくとも1つの記憶装置に接続（結合）される少なくとも1つのプロセッサで構成される場合、記憶装置1つに対して、少なくとも1つのプロセッサが接続されてもよい。また、プロセッサ1つに対して、少なくとも1つの記憶装置が接続されてもよい。また、複数のプロセッサのうち少なくとも1つのプロセッサが、複数の記憶装置のうち少なくとも1つの記憶装置に接続される構成を含んでもよい。また、複数台のコンピュータに含

まれる記憶装置とプロセッサによって、この構成が実現されてもよい。さらに、記憶装置がプロセッサと一体になっている構成（例えば、 L1 キャッシュ、 L2 キャッシュを含むキャッシュメモリ）を含んでもよい。

[0103] ネットワークインタフェース74は、無線又は有線により、通信ネットワーク8に接続するためのインタフェースである。ネットワークインタフェース74は、既存の通信規格に適合したもの等、適切なインタフェースを用いればよい。ネットワークインタフェース74により、通信ネットワーク8を介して接続された外部装置9Aと情報のやり取りが行われてもよい。なお、通信ネットワーク8は、 WAN (Wide Area Network) 、 LAN (Local Area Network) 、 PAN (Personal Area Network) 等のいずれか、又は、それらの組み合わせであってよく、コンピュータ7と外部装置9Aとの間で情報のやりとりが行われるものであればよい。 WAN の一例としてインターネット等があり、 LAN の一例として IEEE 802.11 やイーサネット（登録商標）等があり、 PAN の一例として Bluetooth（登録商標）や NFC (Near Field Communication) 等がある。

[0104] デバイスインタフェース75は、外部装置9Bと直接接続する USB 等のインタフェースである。

[0105] 外部装置9Aは、コンピュータ7とネットワークを介して接続されている装置である。外部装置9Bは、コンピュータ7と直接接続されている装置である。

[0106] 外部装置9A又は外部装置9Bは、一例として、入力装置であってもよい。入力装置は、例えば、カメラ、マイクロフォン、モーションキャプチャ、各種センサ等、キーボード、マウス又はタッチパネル等のデバイスであり、取得した情報をコンピュータ7に与える。また、パーソナルコンピュータ、タブレット端末又はスマートフォン等の入力部とメモリとプロセッサを備えるデバイスであってもよい。

[0107] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、一例として、出力装置でもよい。出力装置は、例えば、 LCD (Liquid Crystal Display) 、有機 EL (Electro Luminescence) パネル等の表示装置であってもよいし、音声等を出力するスピーカ等であってもよい。また、パーソナルコンピュータ、タブレット端末又

はスマートフォン等の出力部とメモリとプロセッサを備えるデバイスであってもよい。

[0108] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、記憶装置（メモリ）であってもよい。例えば、外部装置9Aは、ネットワークストレージ等であってもよく、外部装置9Bは、 HDD 等のストレージであってもよい。

[0109] また、外部装置9A又は外部装置9Bは、前述した実施形態における各装置（情報処理装置）の構成要素の一部の機能を有する装置でもよい。つまり、コンピュータ7は、外部装置9A又は外部装置9Bに処理結果の一部又は全部を送信してもよいし、外部装置9A又は外部装置9Bから処理結果の一部又は全部を受信してもよい。

[0110] 本明細書（請求項を含む）において、「a 、b 及び c の少なくとも1つ（一方）」又は「a 、b 又は c の少なくとも1つ（一方）」の表現（同様な表現を含む）が用いられる場合は、a、b、c、a － b、a － c、b － c 又は a － b － c のいずれかを含む。また、a － a、a － b － b、a － a － b － b － c － c 等のように、いずれかの要素について複数のインスタンスを含んでもよい。さらに、a － b － c － d のように d を有する等、列挙された要素 （a 、b 及び c） 以外の他の要素を加えることも含む。

[0111] 本明細書（請求項を含む）において、「データを入力として／を用いて／データに基づいて／に従って／に応じて」等の表現(同様な表現を含む)が用いられる場合は、特に断りがない場合、データそのものを用いる場合や、データに何らかの処理を行ったもの（例えば、ノイズ加算したもの、正規化したもの、データから抽出した特徴量、データの中間表現等）を用いる場合を含む。また、「データを入力として／を用いて／データに基づいて／に従って／に応じて」何らかの結果が得られる旨が記載されている場合（同様な表現を含む）、特に断りが無い場合、当該データのみに基づいて当該結果が得られる場合や、当該データ以外の他のデータ、要因、条件及び／又は状態等にも影響を受けて当該結果が得られる場合を含む。また、「データを出力する」旨が記載されている場合（同様な表現を含む）、特に断りがない場合、

データそのものを出力として用いる場合や、データに何らかの処理を行ったもの（例えば、ノイズ加算したもの、正規化したもの、データから抽出した特徴量、データの中間表現等）を出力として用いる場合を含む。

[0112] 本明細書（請求項を含む）において、「接続される（connected）」及び「結合される（coupled）」との用語が用いられる場合は、直接的な接続／結合、間接的な接続／結合、電気的（electrically）な接続／結合、通信的（communicatively）な接続／結合、機能的（operatively）な接続／結合、物理的（physically）な接続／結合等のいずれをも含む非限定的な用語として意図される。当該用語は、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきであるが、意図的に或いは当然に排除されるのではない接続／結合形態は、当該用語に含まれるものして非限定的に解釈されるべきである。

[0113] 本明細書（請求項を含む）において、「AがBするよう構成される（A configured to B）」との表現が用いられる場合は、要素Aの物理的構造が、動作Bを実行可能な構成を有するとともに、要素Aの恒常的（permanent）又は一時的（temporary）な設定（setting / configuration）が、動作Bを実際に実行するように設定（configured / set）されていることを含んでよい。例えば、要素Aが汎用プロセッサである場合、当該プロセッサが動作Bを実行可能なハードウェア構成を有するとともに、恒常的（permanent）又は一時的（temporary）なプログラム（命令）の設定により、動作Bを実際に実行するように設定（configured）されていればよい。また、要素Aが専用プロセッサ又は専用演算回路等である場合、制御用命令及びデータが実際に付属しているか否かとは無関係に、当該プロセッサの回路的構造等が動作Bを実際に実行するように構築（implemented）されていればよい。

[0114] 本明細書（請求項を含む）において、含有又は所有を意味する用語（例えば、「含む（comprising / including）」及び「有する（having）」等）が用いられる場合は、当該用語の目的語により示される対象物以外の物を含有又は所有する場合を含む、 open-ended な用語として意図される。これらの含有又は所有を意味する用語の目的語が数量を指定しない又は単数を示唆す

る表現（a 又は an を冠詞とする表現）である場合は、当該表現は特定の数に限定されないものとして解釈されるべきである。

[0115] 本明細書（請求項を含む）において、ある箇所において「1つ又は複数（one or more）」又は「少なくとも1つ（at least one）」等の表現が用いられ、他の箇所において数量を指定しない又は単数を示唆する表現（a 又は an を冠詞とする表現）が用いられているとしても、後者の表現が「1つ」を意味することを意図しない。一般に、数量を指定しない又は単数を示唆する表現（a 又は an を冠詞とする表現）は、必ずしも特定の数に限定されないものとして解釈されるべきである。

[0116] 本明細書において、ある実施形態の有する特定の構成について特定の効果（advantage / result）が得られる旨が記載されている場合、別段の理由がない限り、当該構成を有する他の1つ又は複数の実施形態についても当該効果が得られると理解されるべきである。但し、当該効果の有無は、一般に種々の要因、条件及び／又は状態等に依存し、当該構成により必ず当該効果が得られるものではないと理解されるべきである。当該効果は、種々の要因、条件及び／又は状態等が満たされたときに実施形態に記載の当該構成により得られるものに過ぎず、当該構成又は類似の構成を規定したクレームに係る発明において、当該効果が必ずしも得られるものではない。

[0117] 本明細書（請求項を含む）において、「最大化する（maximize）／最大化（maximization）」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最大値を求めること、グローバルな最大値の近似値を求めること、ローカルな最大値を求めること及びローカルな最大値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきである。また、これら最大値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。同様に、「最小化する（minimize）／最小化（minimization）」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最小値を求めること、グローバルな最小値の近似値を求めること、ローカルな最小値を求めること及びローカルな最小値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきで

ある。また、これら最小値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。同様に、「最適化する（optimize）／最適化（optimization）」等の用語が用いられる場合は、グローバルな最適値を求めること、グローバルな最適値の近似値を求めること、ローカルな最適値を求めること、及びローカルな最適値の近似値を求めることを含み、当該用語が用いられた文脈に応じて適宜解釈されるべきである。また、これら最適値の近似値を確率的又はヒューリスティックに求めることを含む。

[0118] 本明細書（請求項を含む）において、複数のハードウェアが所定の処理を行う場合、各ハードウェアが協働して所定の処理を行ってもよいし、一部のハードウェアが所定の処理の全てを行ってもよい。また、一部のハードウェアが所定の処理の一部を行い、別のハードウェアが所定の処理の残りを行ってもよい。本明細書（請求項を含む）において、「1又は複数のハードウェアが第1処理を行い、前記1又は複数のハードウェアが第2処理を行う」等の表現（同様な表現を含む）が用いられている場合、第1処理を行うハードウェアと第2処理を行うハードウェアは同じものであってもよいし、異なるものであってもよい。つまり、第1処理を行うハードウェア及び第2処理を行うハードウェアが、前記1又は複数のハードウェアに含まれていればよい。なお、ハードウェアは、電子回路、又は、電子回路を含む装置等を含んでもよい。

[0119] 本明細書（請求項を含む）において、複数の記憶装置（メモリ）がデータの記憶を行う場合、複数の記憶装置のうち個々の記憶装置は、データの一部のみを記憶してもよいし、データの全体を記憶してもよい。また、複数の記憶装置のうち一部の記憶装置がデータを記憶する構成を含んでもよい。

[0120] 以上、本開示の実施形態について詳述したが、本開示は上記した個々の実施形態に限定されるものではない。特許請求の範囲に規定された内容及びその均等物から導き出される本開示の概念的な思想と趣旨を逸脱しない範囲において、種々の追加、変更、置き換え及び部分的削除等が可能である。例えば、前述した実施形態において、数値又は数式を説明に用いている場合、これらは例示的な目的で示されたものであり、本開示の範囲を限定するもので

はない。また、実施形態で示した各動作の順序も、例示的なものであり、本開示の範囲を限定するものではない。

符号の説明

[0121] 7 ： コンピュータ、

71 ： プロセッサ、

72 ： 主記憶装置、

73 ： 補助記憶装置、

74 ： ネットワークインタフェース、

75 ： デバイスインタフェース、

76 ： バス、

8 ： ネットワーク、

9A 、 9B ： 外部装置

請求の範囲

[請求項1] 1 又は複数のメモリと、

1 又は複数のプロセッサと、を備え、

前記 1 又は複数のプロセッサは、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、

前記分割された経路を最適化することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する、

情報処理装置。

[請求項2] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記分割された経路に基づいて、遷移状態を取得し、

前記遷移状態に基づいて、前記反応経路を取得する、

請求項１に記載の情報処理装置。

[請求項3] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

Climbing String 法に基づいて、前記遷移状態を取得する、

請求項２に記載の情報処理装置。

[請求項4] 前記分割された経路は、少なくとも第１エネルギーより高いエネルギーを有する第１領域と、前記第１エネルギーより低いエネルギーを有する第２領域と、を含み、

前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記第１領域において、前記第２領域より多くのイメージを定義することにより、前記遷移状態を取得する、

請求項２に記載の情報処理装置。

[請求項5] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記分割された経路におけるエネルギーが最大になる点を探索し、

前記エネルギーが最大となる点を用いて、前記遷移状態を取得する、

請求項２に記載の情報処理装置。

[請求項6] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記エネルギーが最大となる点から所定範囲における補間の間隔を、他の点から所定範囲における補間の間隔より小さくすることにより、前記遷移状態を取得する、

請求項５に記載の情報処理装置。

[請求項7] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記エネルギーが最大となる点から他の点へ向かって補間を実行するタイミングにおいて、前記エネルギーが最大となる点から所定数の補間については第１の値より小さい補間間隔で補間を実行し、前記所定数を超える補間については前記第１の値以上の補間間隔で補間を実行する、

請求項５に記載の情報処理装置。

[請求項8] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記分割された経路に基づく遷移状態の取得処理によって第２の極小点が検出された場合、前記第２の極小点に基づいて前記分割された経路を分割する、

請求項１に記載の情報処理装置。

[請求項9] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記分割された経路に基づいて、第１の手法を用いて遷移状態を探索し、

前記第１の手法の探索結果に基づく第２の手法の実行により、前記遷移状態を取得する、

請求項１に記載の情報処理装置。

[請求項10] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記第１の手法により探索された前記遷移状態の近傍の点に基づいて、前記第２の手法を実行する、

請求項９に記載の情報処理装置。

[請求項11] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記第２の手法が発散した場合、前記第１の手法を用いた前記遷移状態の探索を、実行条件を変えて再度実行する、

請求項９に記載の情報処理装置。

[請求項12] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

第３の手法を用いて、少なくとも、取得した前記遷移状態と前記始状態を接続する経路、又は、取得した前記遷移状態と前記終状態を接続する経路のいずれかを探索し、

前記探索した経路を接続することで、前記反応経路を取得する、

請求項９乃至請求項１１のいずれか１項に記載の情報処理装置。

[請求項13] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記経路の探索処理によって第３の極小点を検出した場合、前記第３の極小点に基づいて前記探索した経路を分割する、

請求項１２に記載の情報処理装置。

[請求項14] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記分割された経路、又は、前記反応経路における２つの極小点の間の距離に基づいてループを検出し、

前記２つの極小点を接続する経路を探索することで前記ループを解消する、

請求項１に記載の情報処理装置。

[請求項15] 1 又は複数のメモリと、

1 又は複数のプロセッサと、を備え、

前記 1 又は複数のプロセッサは、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路に基づく最適化を実行することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得し、

前記 1 又は複数のプロセッサは、前記最適化において、

前記経路に基づいて、エネルギーの極大点を探索し、

前記極大点から所定範囲における補間の間隔を、他の点から所定範囲における補間の間隔より小さくする、

情報処理装置。

[請求項16] 取得された前記経路は、初期の経路である、

請求項１５に記載の情報処理装置。

[請求項17] 前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、

前記分割された経路に対して前記最適化を実行することにより、前記反応経路を取得する、

請求項１５又は請求項１６に記載の情報処理装置。

[請求項18] １ 又は複数のプロセッサにより、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、

前記分割された経路を最適化することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する、

情報処理方法。

[請求項19] 1 又は複数のプロセッサに、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路における極小点に基づいて前記経路を分割し、

前記分割された経路を最適化することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得する、

情報処理方法を実行させる、プログラム。

[請求項20] 1 又は複数のプロセッサにより、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路に基づく最適化を実行することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得し、

前記最適化において、

前記経路に基づいて、エネルギーの極大点を探索し、

前記極大点から所定範囲における補間の間隔を、他の点から所定範囲における補間の間隔より小さくする、

情報処理方法。

[請求項21] 1 又は複数のプロセッサに、

始状態から終状態を接続する経路を取得し、

前記経路に基づく最適化を実行することにより、前記始状態から前記終状態までの反応経路を取得し、

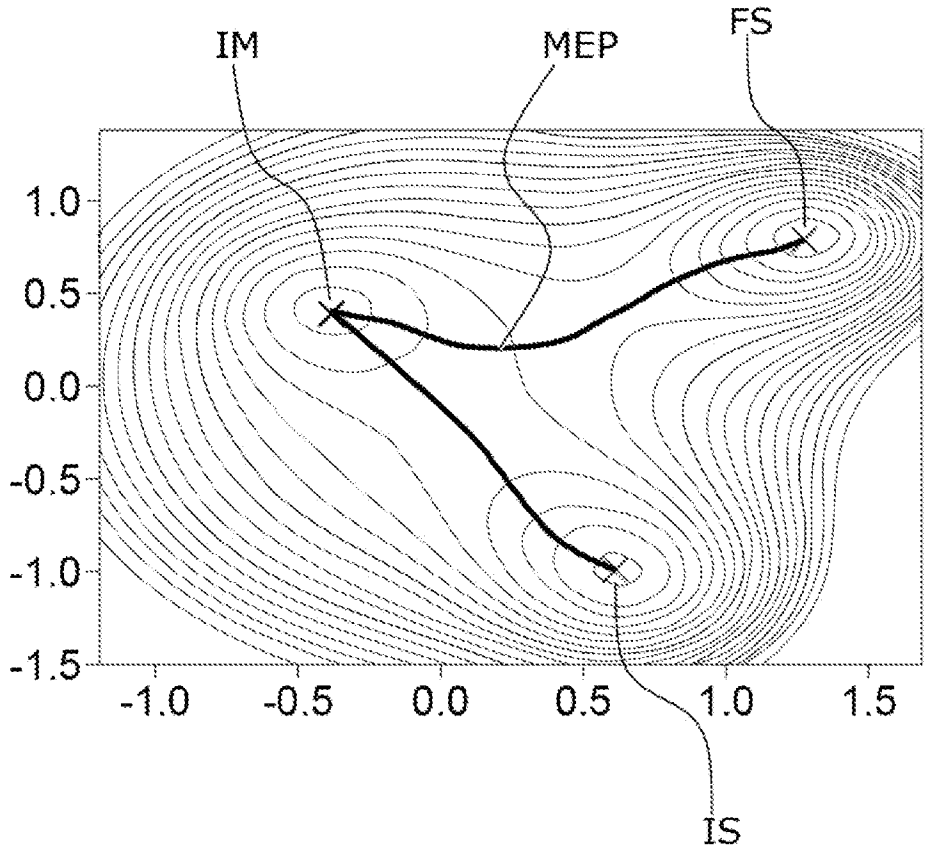
前記最適化において、

前記経路に基づいて、エネルギーの極大点を探索し、

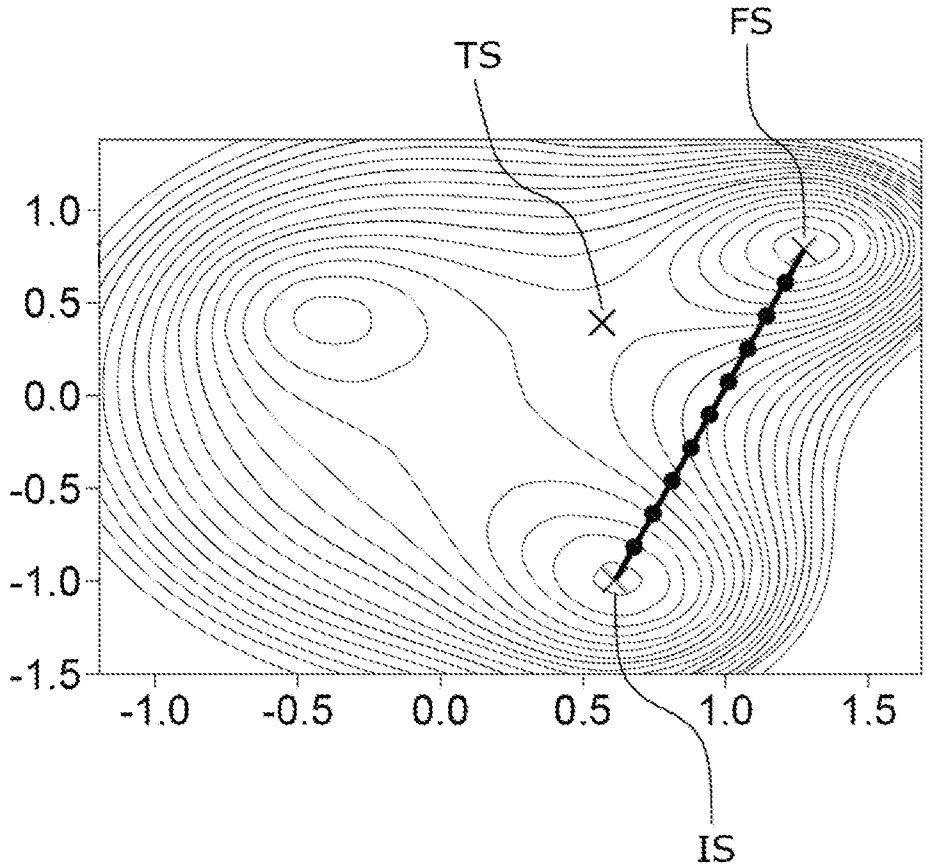
前記極大点から所定範囲における補間の間隔を、他の点から所定範囲における補間の間隔より小さくする、

情報処理方法を実行させるプログラム。

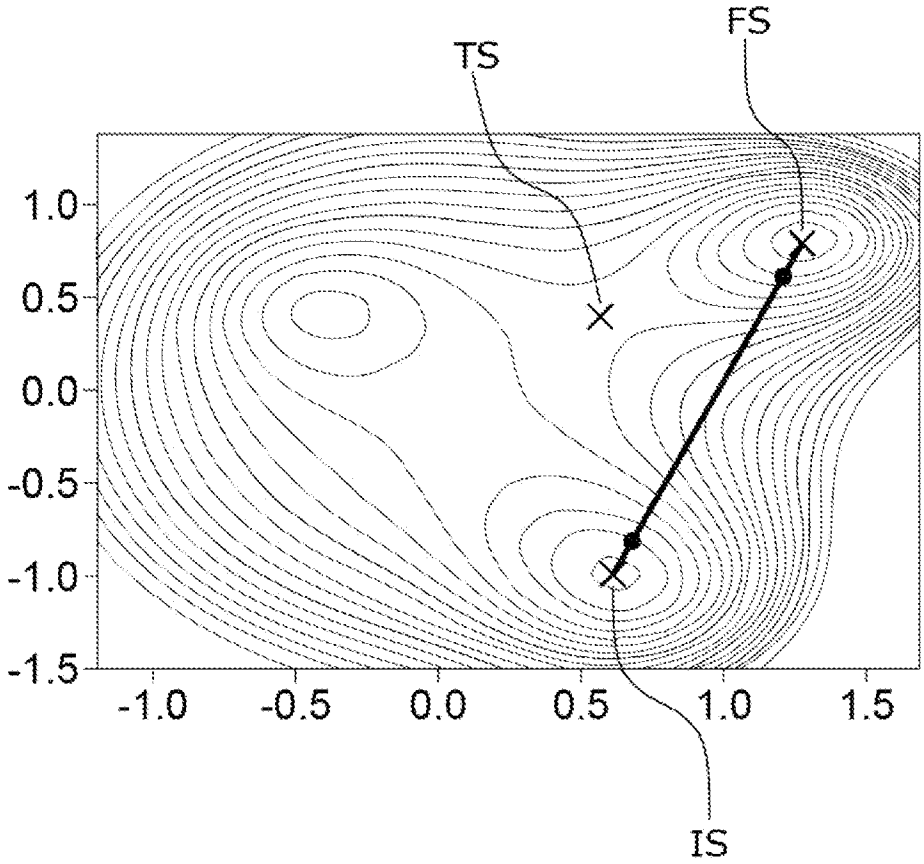
[図1]


IM
MEP
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

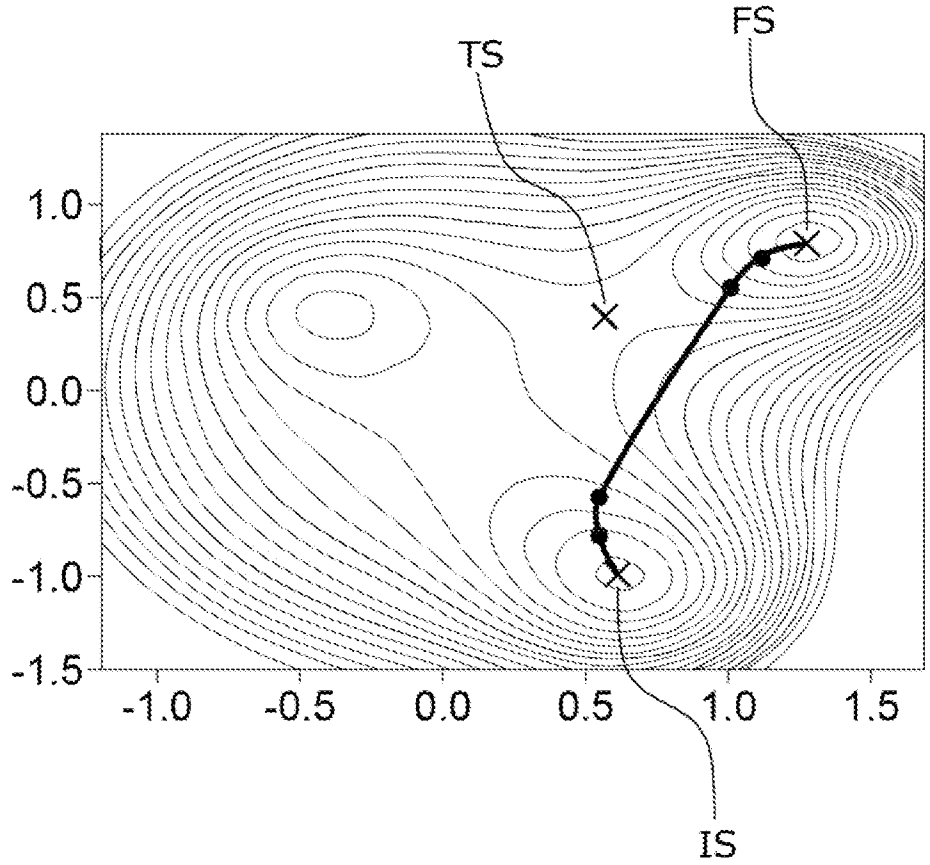
[図2]


TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

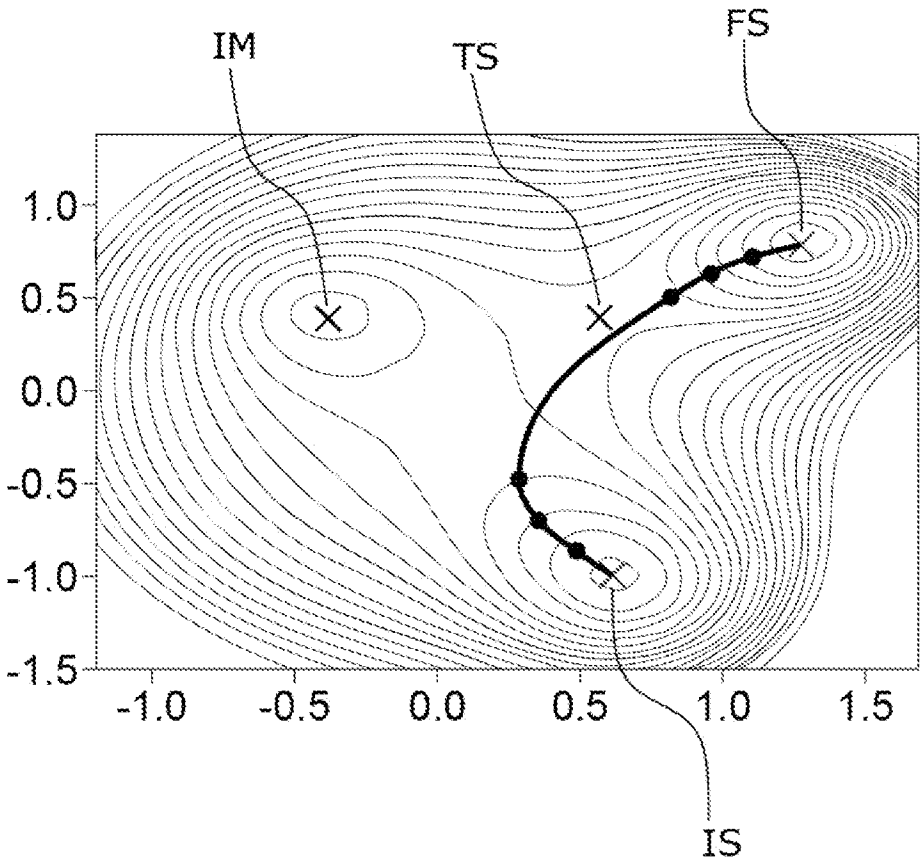
[図3]


TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

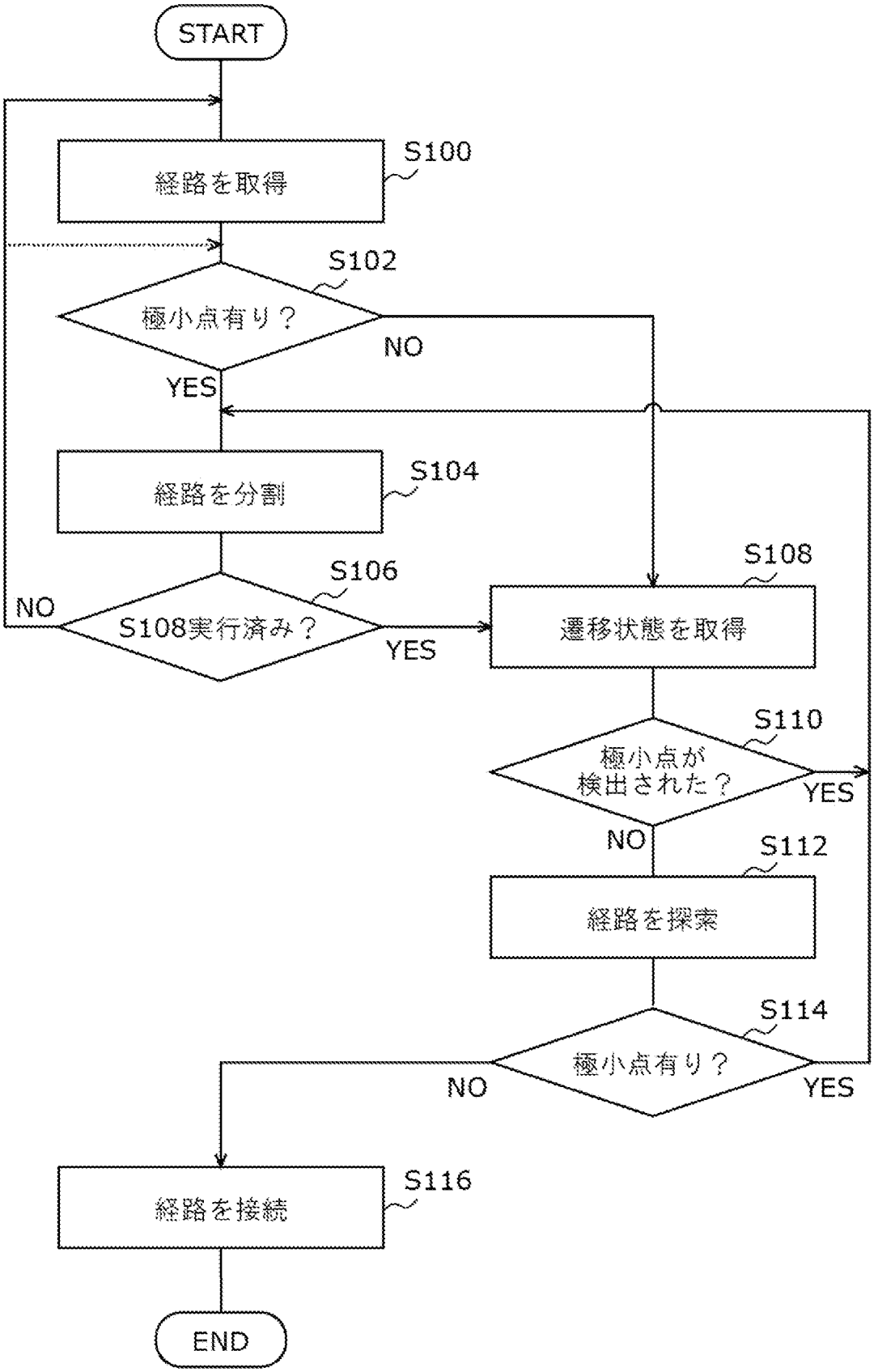
[図4]


TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

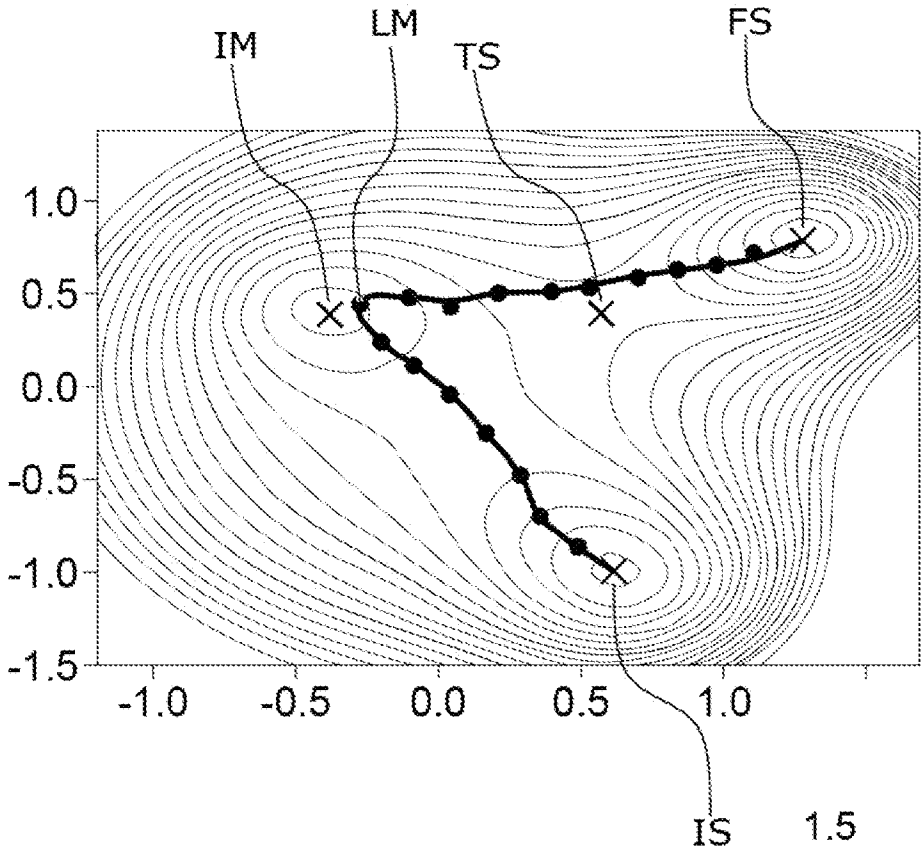
[図5]



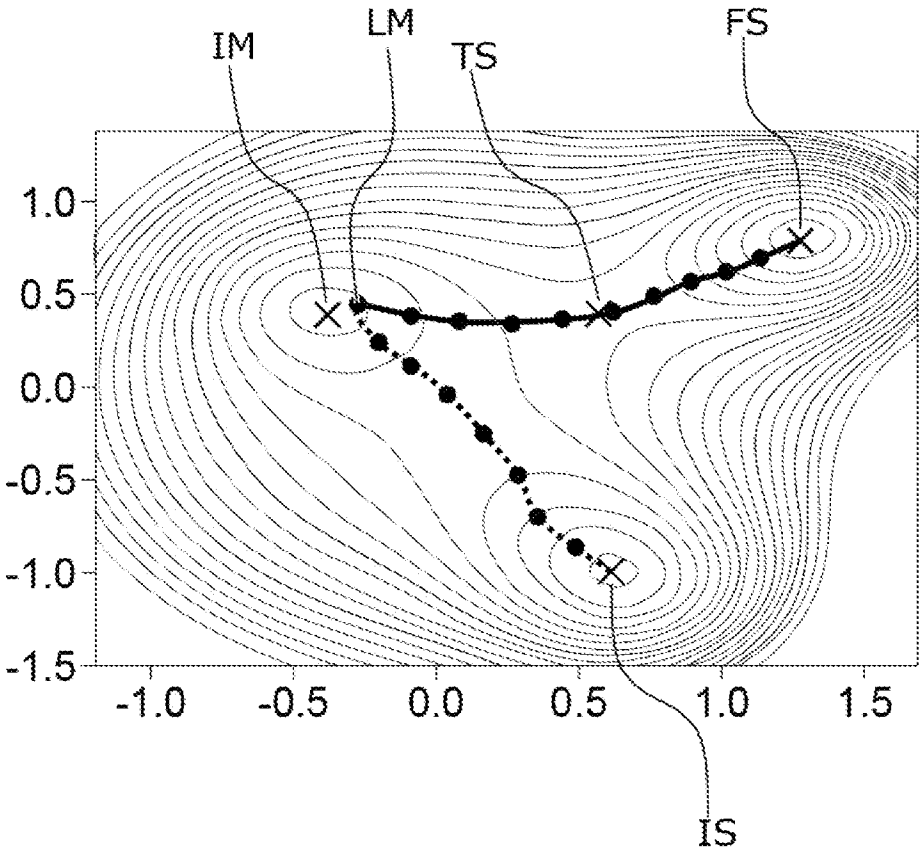
[図6]


START
経路を取得
S100
S102
極小点有り？
NO
YES
経路を分割
S104
S106
S108実行済み？
NO
YES
S108
遷移状態を取得
S110
極小点が
検出された？
YES
NO
S112
経路を探索
S114
極小点有り？
NO
YES
S116
経路を接続
END

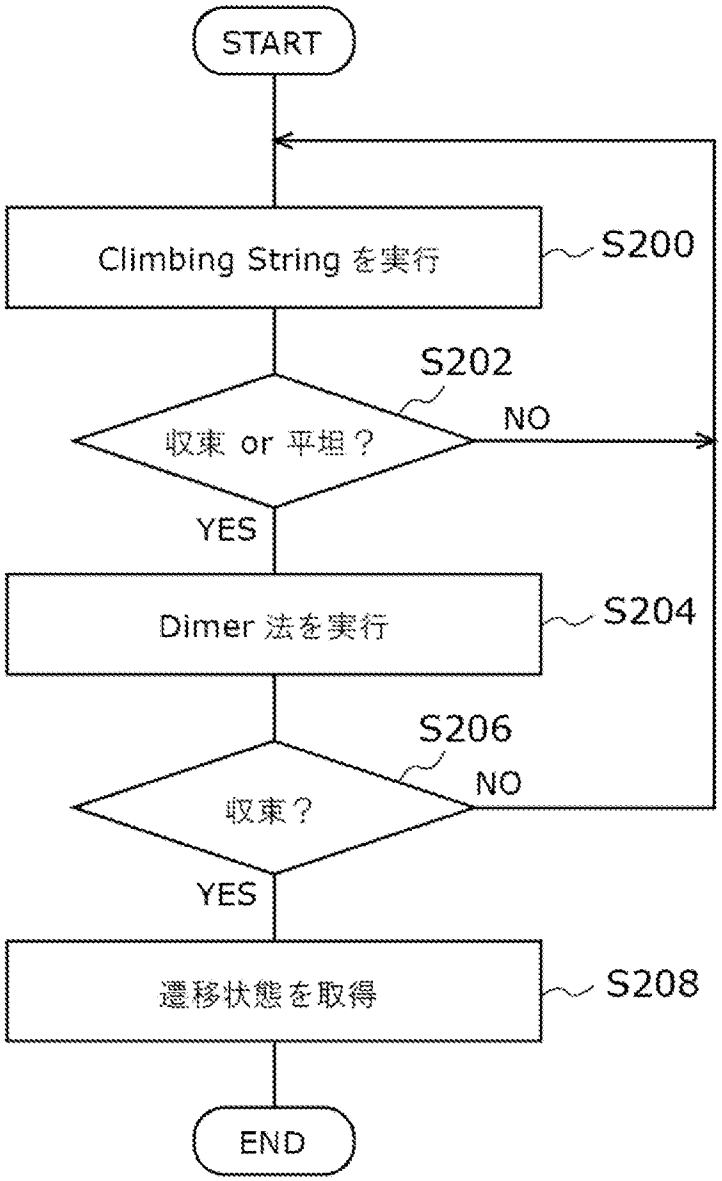
[図7]


IM
LM
TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
IS
1.5

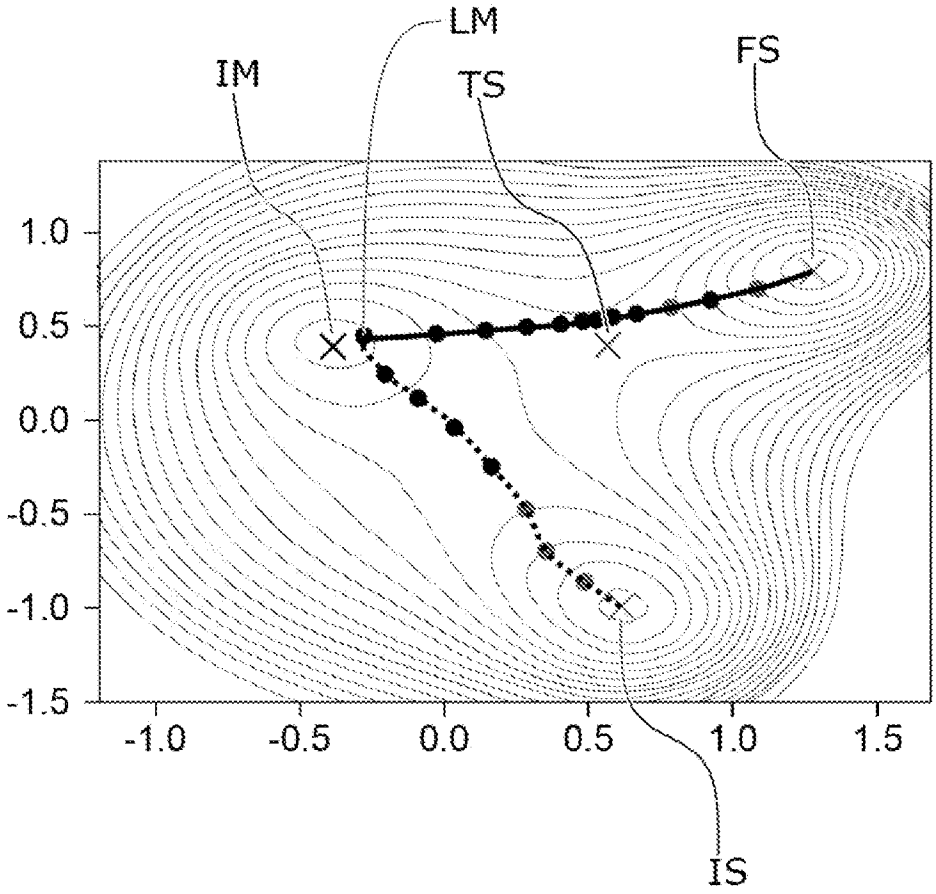
[図8]


IM
LM
TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

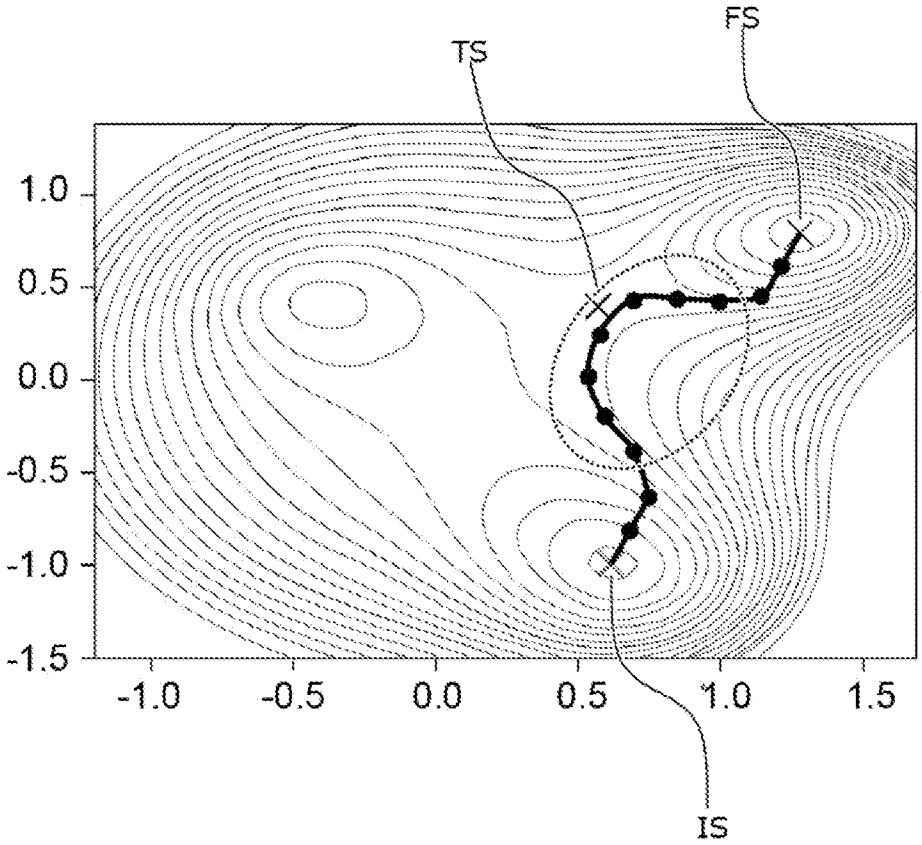
[図9]


START
Climbing String を実行
S200
S202
収束 or 平坦？
NO
YES
Dimer 法を実行
S204
S206
収束？
NO
YES
遷移状態を取得
S208
END

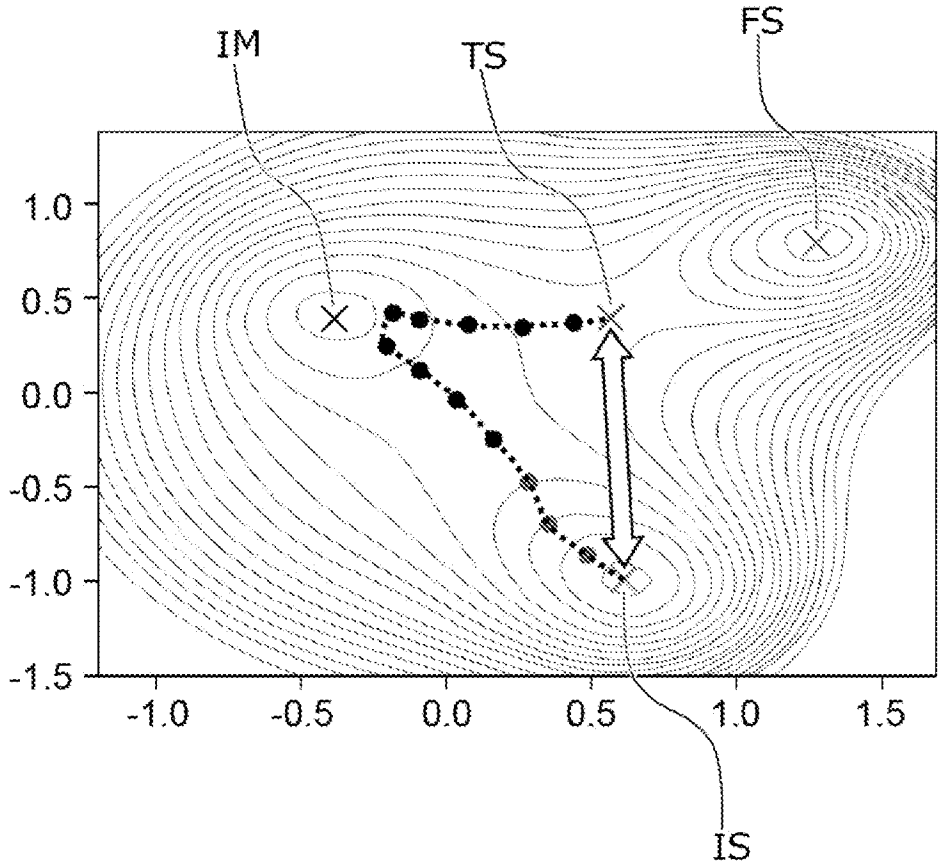
[図10]



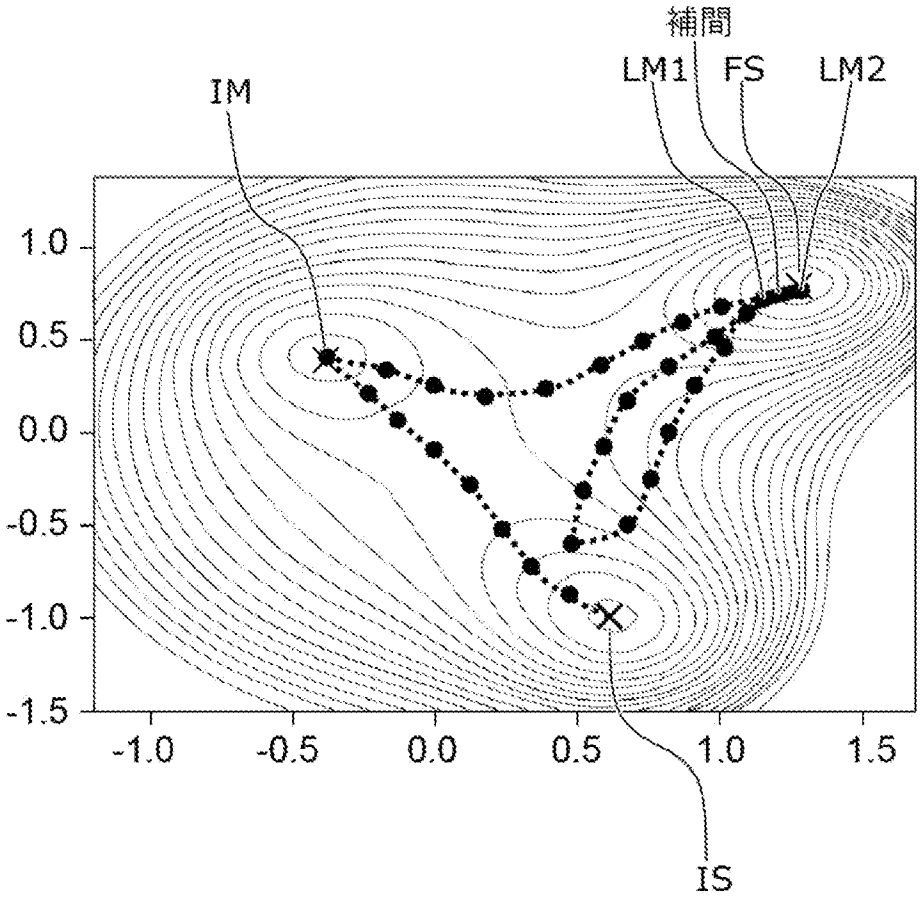
[図11]


TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

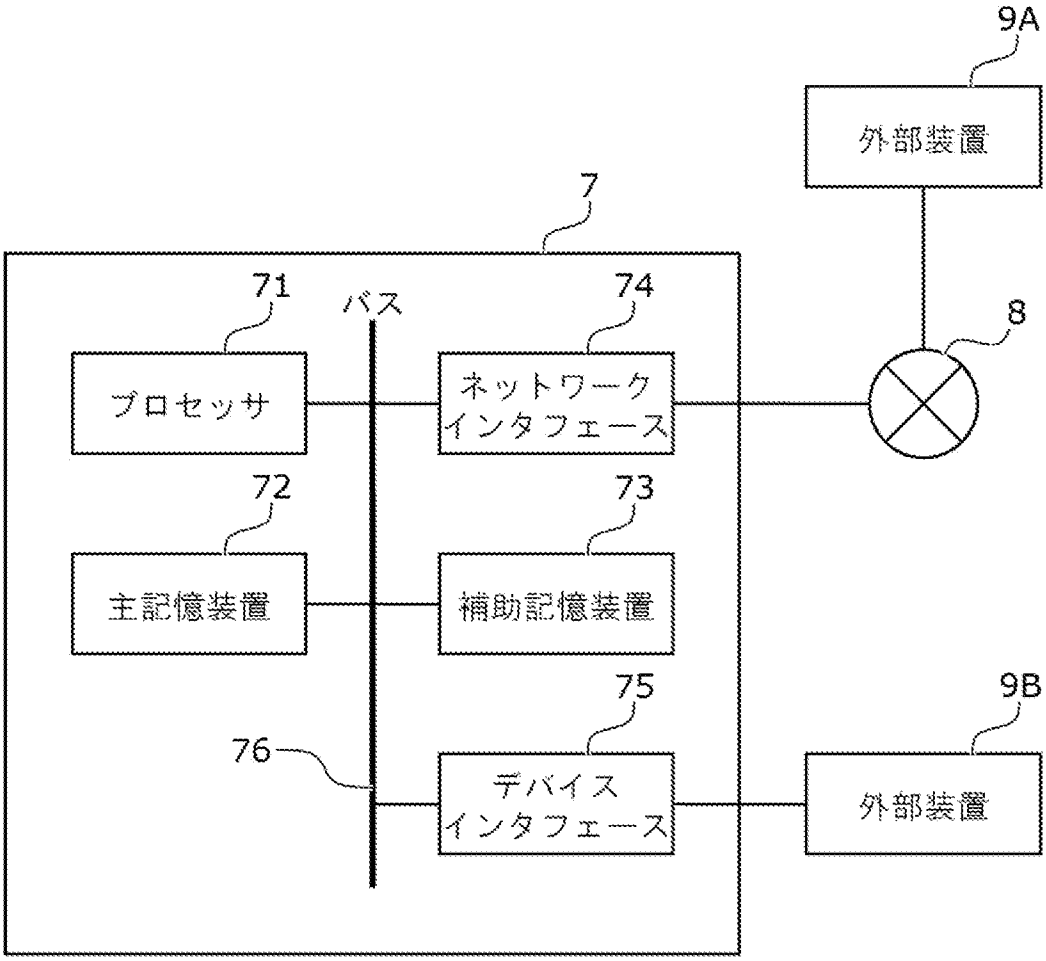
[図12]


IM
TS
FS
1.0
0.5
0.0
-0.5
-1.0
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
IS

[図13]



[図14]


9A
外部装置
7
71
プロセッサ
バス
74
ネットワーク
インタフェース
8
72
主記憶装置
73
補助記憶装置
75
76
デバイス
インタフェース
9B
外部装置

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2023/029556

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 20/10(2019.01)i
FI: G16C20/10

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G16C20/10

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996
Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2023
Registered utility model specifications of Japan 1996-2023
Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	MARAS, E. et al. Global transition path search for dislocation formation in Ge on Si(001) [online]. 2016, [retrieved on 14 September 2023], pp. 1-29, Internet <URL: https://arxiv.org/pdf/1601.06597.pdf> particularly, "abstract", "1. Introduction", "2.2 Global optimization procedure", "2.3 Results", "Appendix B. Modified NEB method", fig. 1, 4	1-2, 5, 8, 18-19
Y		3-4, 6-7, 9-13, 15-17, 20-21
A		14
Y	REN, Weiqing et al. A climbing string method for saddle point search [online]. Journal of Chemical Physics. 2013, [retrieved on 14 September 2023], vol. 138, no. 134105, pp. 1-10, Internet <URL: https://www.researchgate.net/publication/236190741_A_climbing_string_method_for_saddle_point_search/link/546a46600cf2397f783015ef/download> particularly, abstract	3-4, 6-7, 9-13, 15-17, 20-21
A		14

☑ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☑ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
12 September 2023	**26 September 2023**
Name and mailing address of the ISA/JP **Japan Patent Office (ISA/JP)** **3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915** **Japan**	Authorized officer Telephone No.

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
Y	ZHAO, Liming et al. Extending nudged elastic band method to reaction pathways involving multiple spin states [online]. Journal of Chemical Physics. 2020, [retrieved on 14 September 2023], vol. 153, no. 134114, pp. 1-9, Internet <URL: https://eprints.lib.hokudai.ac.jp/dspace/bitstream/2115/82902/1/5.0021923.pdf> particularly, p. 2, left column, lines 33-37, p. 3, right column, line 2 from the bottom to p. 4, left column, line 6, fig. 2	3-4, 6-7, 9-13, 15-17, 20-21
A		14
Y	JP 2019-16163 A (FUJITSU LTD.) 31 January 2019 (2019-01-31) paragraphs [0024]-[0038], fig. 4, 7	3-4, 6-7, 9-13, 15-17, 20-21
A		14
Y	LIN, Ying-Hsuan et al. Epoxide as a precursor to secondary organic aerosol formation from isoprene photooxidation in the presence of nitrogen oxides [online]. PNAS. 2013, [retrieved on 14 September 2023], vol. 110, no. 17, pp. 6718-6723, Internet <URL: https://www.pnas.org/doi/epdf/10.1073/pnas.1221150110> particularly, p. 6720, right column, lines 24-29	3-4, 6-7, 9-13, 15-17, 20-21
A		14

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/JP2023/029556

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2019-16163 A	31 January 2019	US 2019/0012412 A1 paragraphs [0040]-[0050], fig. 4, 7	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2023/029556

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

G16C 20/10(2019.01)i
FI: G16C20/10

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料（国際特許分類（ＩＰＣ））

G16C20/10

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	１９２２－１９９６年
日本国公開実用新案公報	１９７１－２０２３年
日本国実用新案登録公報	１９９６－２０２３年
日本国登録実用新案公報	１９９４－２０２３年

国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）

C. 関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
X	MARAS, E. et al., Global transition path search for dislocation formation in Ge on Si(001), [online], 2016, [検索日2023.09.14], p.1-29, インターネット<URL: https://arxiv.org/pdf/1601.06597.pdf> 特に"Abstract", "1. Introduction", "2.2 Global optimization procedure", "2.3 Results", "Appendix B. Modified NEB method", 図1,4	1-2,5,8,18-19
Y		3-4,6-7,9-13, 15-17,20-21
A		14
Y	REN, Weiqing et al., A climbing string method for saddle point search, [online], Journal of chemical physics, 2013, [検索日2023.09.14], Vol.138, No.134105, p.1-10, インターネット<URL: https://www.researchgate.net/publication/236190741_A_climbing_string_method_for_saddle_point_search/link/546a46600cf2397f783015ef/download> 特に要約	3-4,6-7,9-13, 15-17,20-21
A		14

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☑ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー
"A" 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
"E" 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
"L" 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
"O" 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
"P" 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
"T" 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
"X" 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
"Y" 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
"&" 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
12.09.2023	26.09.2023

名称及びあて先
日本国特許庁(ISA/JP)
〒100-8915
日本国
東京都千代田区霞が関三丁目４番３号

権限のある職員（特許庁審査官）
山田　倍司 5R 3854

電話番号 03-3581-1101 内線 3502

C.　関連すると認められる文献

引用文献のカテゴリー*	引用文献名　及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する請求項の番号
Y	ZHAO, Liming et al., Extending nudged elastic band method to reaction pathways involving multiple spin states, [online], Journal of chemical physics, 2020, [検索日2023.09.14], Vol.153, No.134114, p.1-9, インターネット<URL: https://eprints.lib.hokudai.ac.jp/dspace/bitstream/2115/82902/1/5.0021923.pdf> 特にp.2左欄33行-37行,p.3右欄下から2行-p.4左欄6行, 図2	3-4,6-7,9-13,15-17,20-21
A		14
Y	JP 2019-16163 A (富士通株式会社) 31.01.2019 (2019-01-31) [0024]-[0038], 図4,7	3-4,6-7,9-13,15-17,20-21
A		14
Y	LIN, Ying-Hsuan, et al., Epoxide as a precursor to secondary organic aerosol formation from isoprene photooxidation in the presence of nitrogen oxides, [online], PNAS, 2013, [検索日2023.09.14], Vol.110, No.17, p.6718-6723, インターネット<URL: https://www.pnas.org/doi/epdf/10.1073/pnas.1221150110> 特にp.6720右欄24-29行	3-4,6-7,9-13,15-17,20-21
A		14

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号
PCT/JP2023/029556

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2019-16163 A	31.01.2019	US 2019/0012412 A1 [0040]-[0050], 図4,7	