



(21) 申请号 201980032737.2

(22) 申请日 2019.08.20

(65) 同一申请的已公布的文献号
申请公布号 CN 112119466 A

(43) 申请公布日 2020.12.22

(30) 优先权数据
2018-164752 2018.09.03 JP

(85) PCT国际申请进入国家阶段日
2020.11.16

(86) PCT国际申请的申请数据
PCT/JP2019/032350 2019.08.20

(87) PCT国际申请的公布数据
W02020/049994 JA 2020.03.12

(73) 专利权人 松下知识产权经营株式会社
地址 日本大阪府

(72) 发明人 若杉健介 森川幸治

(74) 专利代理机构 北京市中咨律师事务所
11247

专利代理师 张洁 段承恩

(51) Int.Cl.

G16C 10/00 (2006.01)

G06N 20/00 (2006.01)

(56) 对比文件

CN 106030424 A, 2016.10.12

CN 106572832 A, 2017.04.19

CN 106580346 A, 2017.04.26

CN 107019496 A, 2017.08.08

CN 107683460 A, 2018.02.09

JP 2010055303 A, 2010.03.11

JP 2016006617 A, 2016.01.14

JP 2016139336 A, 2016.08.04

JP 2017220001 A, 2017.12.14

KR 20120085163 A, 2012.07.31

US 2012330632 A1, 2012.12.27

LI LI et al.. “Pure density functional for strong correlations and the thermodynamic limit from machine learning”.《ARXIV》.2006,第1-9页. (续)

审查员 余海英

权利要求书2页 说明书19页 附图15页

(54) 发明名称

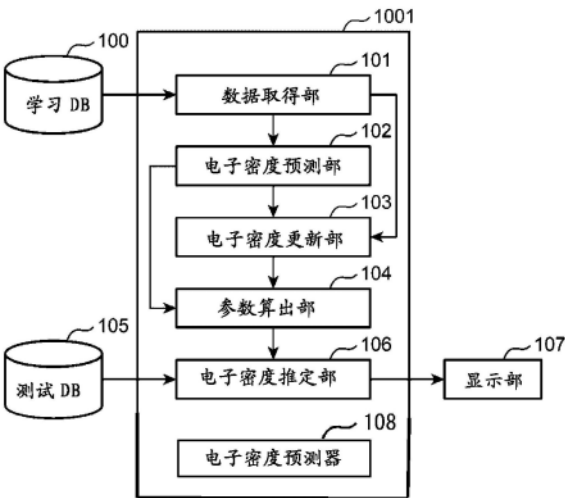
电子密度推定方法、电子密度推定装置及电子密度推定程序

(57) 摘要

电子密度推定方法包括：通过将第1输入数据输入到电子密度预测器来算出第1电子密度；执行使用第1输入数据和第1电子密度的数值模拟来算出第2电子密度，数值模拟是将第1输入数据和第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理进行一次以上的处理，所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值；通过算出使第1电子密度与第2电子密度的差量最小化的电子密度预测器的参数来使所述电子密度预测器学习；从测试数据库取得第2输入数据，向被设定了算出的参数的电子密度预测器输入所述第2输入数据，推定第3

电子密度；将推定出的所述第3电子密度输出。

1000



[接上页]

(56) 对比文件

颜炜伟.用量子化学参数预测聚合物玻璃化

温度.湖南工程学院学报(自然科学版).2010,
(第02期),第59-62页.

1. 一种电子密度推定方法,是根据与物质的组成和结构有关的物质信息推定所述物质的电子密度的电子密度推定装置中的电子密度推定方法,

所述电子密度推定装置的计算机,

(a1) 从存储有所述物质信息的学习数据库取得第1输入数据;

(a2) 通过将所述第1输入数据输入到电子密度预测器来算出第1电子密度;

(a3) 执行使用所述第1输入数据和所述第1电子密度的数值模拟来算出第2电子密度,所述数值模拟是将所述第1输入数据和所述第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理执行一次以上的处理,所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值;

(a4) 通过算出使所述第1电子密度与所述第2电子密度的差量最小化的所述电子密度预测器的参数来使所述电子密度预测器进行学习;

(a5) 从存储有所述物质信息的测试数据库取得第2输入数据,向被设定了所述参数的所述电子密度预测器输入所述第2输入数据,推定第3电子密度;

(a6) 将推定出的所述第3电子密度输出。

2. 根据权利要求1所述的电子密度推定方法,

在所述(a1)到所述(a4)的处理反复进行预定次数后,实施所述(a5)。

3. 根据权利要求2所述的电子密度推定方法,

在所述(a3)中,

(b1) 在通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度满足预定条件的情况下,实施所述数值模拟来更新所述第2电子密度,并使处理前进至所述(a4);

(b2) 在通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度不满足所述预定条件的情况下,不使所述第2电子密度更新,而使处理前进至所述(a4)。

4. 根据权利要求3所述的电子密度推定方法,

所述预定条件是通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度与第4电子密度的第2差量大于通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度与第5电子密度的第3差量,

所述第4电子密度是在通过所述(b1)更新出的所述第2电子密度的算出中使用了的所述第1电子密度,

所述第5电子密度是通过所述(b1)更新出的所述第2电子密度。

5. 根据权利要求1至4中任一项所述的电子密度推定方法,

所述物质信息是使用晶体学通用数据格式记载的信息。

6. 根据权利要求1至4中任一项所述的电子密度推定方法,

在所述(a4)中,使用所述第2电子密度作为监督数据而使所述电子密度预测器学习。

7. 根据权利要求1至4中任一项所述的电子密度推定方法,

在所述(a6)中,使表示所述第3电子密度的图像显示于显示器。

8. 一种电子密度推定装置,是根据与物质的组成和结构有关的物质信息推定所述物质的电子密度的电子密度推定装置,具备:

数据取得部,其从存储有所述物质信息的学习数据库取得第1输入数据;

电子密度预测部,其通过将所述第1输入数据输入到电子密度预测器来算出第1电子密度;

电子密度更新部,其执行使用所述第1输入数据和所述第1电子密度的数值模拟来算出第2电子密度,所述数值模拟是将所述第1输入数据和所述第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理执行一次以上的处理,所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值;

参数算出部,其通过算出使所述第1电子密度与第2电子密度的差量最小化的所述电子密度预测器的参数来使所述电子密度预测器进行学习;

电子密度推定部,其从存储有所述物质信息的测试数据库取得第2输入数据,向被设定了所述参数的所述电子密度预测器输入所述第2输入数据,推定第3电子密度;以及

输出部,其将推定出的所述第3电子密度输出。

9. 一种计算机可读的存储介质,存储有电子密度推定程序,

所述电子密度推定程序使计算机执行权利要求1至7中任一项所述的电子密度推定方法。

10. 一种电子密度推定方法,是通过计算机执行的电子密度推定方法,包括:

(a1) 从存储有与物质的组成和结构有关的物质信息及测试数据库的学习数据库取得第1输入数据,所述物质信息包含所述第1输入数据,所述测试数据库包含第2输入数据;

(a2) 电子密度预测器基于所述第1输入数据和第1参数,算出第1电子密度 D_{11} ;

(a3) 使用密度泛函方法进行一次以上的更新电子密度的计算,算出第2电子密度,所述一次以上的计算包括基于所述第1输入数据和所述第1电子密度 D_{11} 的使用所述密度泛函方法的计算,所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值;

(a4) 所述电子密度预测器基于所述第1输入数据和第 i 参数,算出第 i 电子密度 D_{1i} ,其中, $i=2\sim n$;

(a5) 算出作为所述第1电子密度 D_{1j} 与所述第2电子密度的差量的第1差量 DF_{1j} ,检测所述第1差量 $DF_{11}\sim$ 所述第1差量 DF_{1n} 中最小的所述第1差量 DF_{1k} ,其中, $j=1\sim n, 1\leq k\leq n$;

(a6) 取得所述第2输入数据,向被设定了所述第 k 参数的所述电子密度预测器输入所述第2输入数据,推定第3电子密度;

(a7) 将推定出的所述第3电子密度输出。

电子密度推定方法、电子密度推定装置及电子密度推定程序

技术领域

[0001] 本公开涉及推定物质的电子密度的技术。

背景技术

[0002] 以往,基于物理定律,开发了反复进行将物质中的电子密度更新的计算并求取电子密度的收敛值的被称为密度泛函方法的技术(例如非专利文献1)。另外,也已知有使用密度泛函方法开发催化剂的技术(例如专利文献1)。如此,密度泛函方法作为用于开发新物质的工具而被利用。

[0003] 另外,近年来也开发了使用通过机器学习所获得的预测器预测电子密度的技术。例如,非专利文献2公开了根据物质中的势能(potential)推定电子密度的方法。具体而言,在非专利文献2中公开了以下技术:对于特定的物质,改变多个原子间距离及角度而利用密度泛函方法算出电子密度的收敛值,使用算出的电子密度的收敛值来使预测电子密度的预测器学习,并使用得到的预测器,预测相对于所有的原子间距离及角度的电子密度。

[0004] 非专利文献3公开了根据物质中的势能推定电子能量的方法。具体而言,在非专利文献3中,公开了使用深度神经网络(DNN:Deep Neural Network)从二维的随机势能或者方阱势能推定可通过求解薛定谔方程式获得的电子能量的技术。

[0005] 现有技术文献

[0006] 专利文献

[0007] 专利文献1:日本专利第6015336号公报

[0008] 非专利文献

[0009] 非专利文献1:Kohn,W.,&Sham,L.J.(1965).Self-consistent equations including exchange and correlation effects.Physical review,140(4A),A1133.

[0010] 非专利文献2:Brockherde,F.,Vogt,L.,Li,L.,Tuckerman,M.E.,Burke,K.,&Mueller,K.R.(2017).Bypassing the Kohn-Sham equations with machine learning.Nature communications,8(1),872.

[0011] 非专利文献3:Mills,K.,Spanner,M.,&Tamblyn,I.(2017).Deep learning and the Schroedinger equation.Physical Review A,96(4),042113.

[0012] 非专利文献4:Finger,L.W.,&Hazen,R.M.(1978).Crystal structure and compression of ruby to 46kbar.Journal of Applied Physics,49(12),5823-5826.

[0013] 非专利文献5:Cicek,oe.,Abdulkadir,A.,Lienkamp,S.S.,Brox,T.,&Ronneberger,O.(2016,October).3D U-Net:learning dense volumetric segmentation from sparse annotation.In International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention(pp.424-432).Springer,Cham.

[0014] 非专利文献6:Bergerhoff,G.,Brown,I.D.,&Allen,F.(1987).Crystallographic databases.International Union of Crystallography,Chester,360,77-95.

发明内容

[0015] 然而,上述的现有技术需要电子密度的收敛值作为预测器的学习数据,因此需要进一步的改善。

[0016] 本公开用于解决上述的问题,目的在于提供一种不使用电子密度的收敛值而使电子密度预测器进行学习的技术。

[0017] 本公开的一个技术方案涉及的电子密度推定方法,是根据与物质的组成和结构有关的物质信息推定所述物质的电子密度的电子密度推定装置中的电子密度推定方法,所述电子密度推定装置的计算机,(a1)从存储有所述物质信息的学习数据库取得第1输入数据;(a2)通过将所述第1输入数据输入到电子密度预测器来算出第1电子密度;(a3)执行使用所述第1输入数据和所述第1电子密度的数值模拟(simulation)来算出第2电子密度,所述数值模拟是将所述第1输入数据和所述第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理执行一次以上的处理,所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值;(a4)通过算出使所述第1电子密度与所述第2电子密度的差量最小化的所述电子密度预测器的参数来使所述电子密度预测器进行学习;(a5)从存储有所述物质信息的测试数据库取得第2输入数据,向被设定了所述参数的所述电子密度预测器输入所述第2输入数据,推定第3电子密度;(a6)将推定出的所述第3电子密度输出。

[0018] 根据本公开,不使用利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值,就能够使电子密度预测器学习以使得电子密度预测器的输出值接近于利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值。

附图说明

[0019] 图1是表示电子密度的具体的值的一例的图。

[0020] 图2是示意性地表示在密度泛函方法中通过反复进行将电子密度更新的计算从而电子密度被更新的情形的图。

[0021] 图3是表示学习电子密度预测器时算出的差量的图。

[0022] 图4是示意性地表示将由电子密度预测器所获得的预测值设定为密度泛函方法中的初始电子密度并通过反复进行将电子密度更新的计算从而电子密度被更新的情形的图。

[0023] 图5是表示使用预测值进行一次密度泛函方法中的将电子密度更新的计算来求取更新值而且将求出的更新值作为监督数据(教师数据)而使电子密度预测器进行学习的情况的示意图。

[0024] 图6是表示关于使用了被称为Cifar10的自然图像数据集的分类问题而在变更了学习数据数量的情况下的学习的推移的图。

[0025] 图7是表示本公开的实施方式涉及的电子密度推定系统的构成的框图。

[0026] 图8是表示图7的电子密度更新部的详细构成的框图。

[0027] 图9是表示以被称为CIF(Crystallographic Information File,晶体学信息文件)的形式记载的第1输入数据的一例的图。

[0028] 图10是表示以被称为POSCAR的形式记载的第1输入数据的一例的图。

[0029] 图11是表示描述符的一例的图。

[0030] 图12是表示初始电子密度、第1电子密度以及电子密度预测器的一例的图。

- [0031] 图13是表示根据第1电子密度算出第2电子密度的处理的一例的图。
- [0032] 图14是表示推定第3电子密度的处理的一例的图。
- [0033] 图15是表示本公开的实施方式1中的电子密度推定装置的处理的整体流程的流程图。
- [0034] 图16是对图15的步骤S102中的电子密度更新部的处理的详情进行说明的流程图。
- [0035] 图17是对本公开的实施方式2的处理进行说明的图。
- [0036] 图18是对本公开的实施方式2的处理进行说明的图。
- [0037] 图19是表示本公开的实施方式2涉及的处理的一例的流程图。
- [0038] 图20是表示关于 Al_2O_3 (氧化铝) 的单位晶格(点阵) 向量、原子坐标、原子序数、原子半径等的图。
- [0039] 图21是表示将第1输入数据与原子序数或者原子半径组合而表现出的铝晶体的描述符的一例等的图。

具体实施方式

[0040] (得到本公开的见解)

[0041] 在进行新的材料开发时,需要预测能带隙 (band gap) 以及形成能等物质的特性值,但是为此需要计算物质中的电子密度,因此,一直以来,非专利文献1所示的密度泛函方法都被用作新的材料开发的有效工具 (例如专利文献1)。

[0042] 另一方面,近年来,提出了利用深层神经网络、核岭 (kernel ridge) 回归以及支持向量机 (Support Vector Machine) 等机器学习方法从物质的势能预测电子密度以及电子能量的方法。在该方法中,预先准备利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值或者电子能量的收敛值,以使收敛值与预测值的误差最小化的方式进行预测器的参数的更新,使预测器学习。

[0043] 例如非专利文献2中公开了以下技术:对于具有特定结构的物质,利用密度泛函方法算出电子密度的收敛值,使用算出的电子密度的收敛值来使电子密度预测器学习。

[0044] 然而,在非专利文献2中,由于仅使预测器对例如具有钙钛矿 (perovskite) 结构这样的特定结构的物质进行学习,因此存在对于结构与学习了的物质不同的未知的物质则无法预测准确的电子密度这一问题。

[0045] 另外,要利用密度泛函方法获得收敛值,据说以当前状况的计算机的能力,一个物质就要花费3个星期左右,这样的话,为了获得学习所需的大量物质的收敛值就需要几年左右。因此,利用密度泛函方法获得收敛值的非专利文献2的方法存在要花费大量的时间来收集监督数据这一问题。

[0046] 非专利文献3中公开了使用深度神经网络推定可通过求解薛定谔方程式获得的电子能量的技术。

[0047] 然而,在非专利文献3中,由于深度神经网络的学习需要大规模的学习数据,因此存在需要大量时间来准备学习数据这一问题。另外,非专利文献3中没有关于不使用利用密度泛函方法求出的收敛值而使深度神经网络进行学习的公开。

[0048] 此外,非专利文献1是公开密度泛函方法的基本技术的现有技术文献,没有关于通过机器学习使预测器进行学习的公开。另外,专利文献1只不过公开了在计算锚 (anchor) 粒

子与贵金属粒子在900℃的比较结合能时利用非专利文献1所示的密度泛函方法,而没有关于通过机器学习使预测器进行学习的公开。再者,非专利文献4、5是公开后述的技术的现有技术文献。

[0049] 于是,本发明人对密度泛函方法中的求取电子密度的更新值的计算和基于机器学习的电子密度预测器的参数更新进行考量,发现了以下内容并想到了本公开:通过将求取电子密度的更新值的计算处理编入到电子密度预测器的学习处理中,能够不使用利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值就使电子密度预测器学习以使得电子密度预测器的输出值接近于利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值。

[0050] 即,本公开的目的在于,提供一种不使用利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值就能够使电子密度预测器学习以使得电子密度预测器的输出值接近于利用密度泛函方法求出的收敛值的技术。

[0051] 本公开的一个技术方案涉及的电子密度推定方法,是根据与物质的组成和结构有关的物质信息推定所述物质的电子密度的电子密度推定装置中的电子密度推定方法,所述电子密度推定装置的计算机,(a1)从存储有所述物质信息的学习数据库取得第1输入数据;(a2)通过将所述第1输入数据输入到电子密度预测器来算出第1电子密度;(a3)执行使用所述第1输入数据和所述第1电子密度的数值模拟来算出第2电子密度,所述数值模拟是将所述第1输入数据和所述第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理执行一次以上的处理,所述第2电子密度不是使用所述密度泛函方法求出的收敛值;(a4)通过算出使所述第1电子密度与所述第2电子密度的差量最小化的所述电子密度预测器的参数来使所述电子密度预测器进行学习;(a5)从存储有所述物质信息的测试数据库取得第2输入数据,向被设定了所述参数的所述电子密度预测器输入所述第2输入数据,推定第3电子密度;(a6)将推定出的所述第3电子密度输出。

[0052] 根据本构成,执行将第1输入数据和第1电子密度设定为初始值并将使用密度泛函方法的更新电子密度的处理进行一次以上的数值模拟。而且,电子密度预测器进行学习以使通过该数值模拟所获得的第2电子密度与第1电子密度的差量最小化。第2电子密度不是使用密度泛函方法求出的收敛值。如此,本构成使用作为通过数值模拟所获得的更新值的第2电子密度,使电子密度预测器进行了学习。因此,本构成能够不使用收敛值而使电子密度预测器进行学习。其结果,无需花费大量的时间和劳力就能够准备学习数据,能够使生成电子密度预测器所需要的成本降低。

[0053] 在上述构成中,也可以为,在所述(a1)到所述(a4)的处理反复进行预定次数后,实施所述(a5)。

[0054] 根据本构成,能够一边通过数值模拟来更新第2电子密度,一边使电子密度预测器学习,因此,能够高效地进行数值模拟和电子密度预测器的学习。

[0055] 在上述构成中,也可以为,在所述(a3)中,(b1)在通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度满足预定条件的情况下,实施所述数值模拟来更新所述第2电子密度,并使处理前进至所述(a4);(b2)在通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度不满足所述预定条件的情况下,不使所述第2电子密度更新,而使处理前进至所述(a4)。

[0056] 根据本构成,不是在第1电子密度每次更新时都使第2电子密度更新,而是在第1电子密度在某种程度上接近第2电子密度后才更新第2电子密度,因此能够抑制花费处理成本

的数值模拟的执行次数,高效地使电子密度预测器学习。

[0057] 在上述构成中,也可以为,所述预定条件是通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度与第4电子密度的第2差量大于通过所述(a2)更新出的所述第1电子密度与第5电子密度的第3差量,所述第4电子密度是在通过所述(b1)更新出的所述第2电子密度的算出中使用了的所述第1电子密度,所述第5电子密度是通过所述(b1)更新出的所述第2电子密度。

[0058] 根据本构成,能够以与作为在第2电子密度的更新中使用了的第1电子密度的第4电子密度相比作为更新出的第2电子密度的第5电子密度更接近于更新出的第1电子密度为条件来使第2电子密度更新。因此,能够抑制数值模拟的执行次数,使电子密度预测器高效地学习。

[0059] 在上述构成中,也可以为,所述物质信息是使用晶体学通用数据格式记载的信息。

[0060] 根据本构成,由于使用已有的数据格式记载了物质信息,因此使向计算机安装第1输入数据变得容易。

[0061] 在上述构成中,也可以为,在所述(a4)中,使用所述第2电子密度作为监督数据而使所述电子密度预测器学习。

[0062] 根据本构成,能够使电子密度预测器学习以使得第1电子密度接近第2电子密度。

[0063] 在上述构成中,也可以为,在所述(a6)中,使表示所述第3电子密度的图像显示于显示器。

[0064] 根据本构成,能够使用户在视觉上识别第3电子密度。

[0065] 上述的电子密度推定方法的作用效果也同样能在电子密度推定装置以及电子密度推定程序中实现。

[0066] (实施方式1)

[0067] 首先,对本公开的电子密度推定装置不使用利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值就能够使电子密度预测器学习的理由进行说明。图1是表示电子密度的具体的值的一例的图。在利用密度泛函方法求取物质的单位晶格中的电子密度的情况下,单位晶格被划分为 $24 \times 24 \times 24$ 的三维的多个晶胞(cell),各晶胞中保持有表示电子密度的实数值。在此,单位晶格例如为体心立方晶格或者面心立方晶格,这些单位晶格被划分为 $24 \times 24 \times 24$ 的三维的晶胞。在求取空间内的电子密度的情况下,考虑为空间的各点由一个晶胞表示,各晶胞保持有电荷,可求取各晶胞的电子密度的大小。此外,将单位晶格进行划分时的各维的晶胞的个数不限于24,也可以采用24以外的任意值。另外,将单位晶格进行划分时的各维的晶胞的个数也可以按维度采用不同的值。

[0068] 图2是示意性地表示在密度泛函方法中通过反复进行将电子密度更新的计算从而电子密度被更新的情形的图。在图2中,纵轴表示参数Y,横轴表示参数X。在图2中表示了上述的 $24 \times 24 \times 24$ 个晶胞中的某2个晶胞中的电子密度通过反复进行更新电子密度的计算从而电子密度被更新的情形。参数X表示2个中的一个晶胞的电子密度,参数Y表示2个晶胞中的另一个晶胞的电子密度。因此,在图2的图表(graph)中各点由2个晶胞的电子密度的集合所构成。此外,在图1的例子中,晶胞的个数为 $24 \times 24 \times 24$ 个,因此,在该情况下,在图2的图表中各点由 $24 \times 24 \times 24$ 个电子密度的集合所构成。关于这些,在图3、图4、图5中也是相同的。

[0069] 初始值500和初始值501各自表示密度泛函方法中的初始电子密度。收敛值502表

示由密度泛函方法最终获得的电子密度。即,收敛值502是反复进行密度泛函方法中的更新电子密度的计算而使电子密度收敛后的值。如图2所示,在理论上,即使在反复进行更新电子密度的计算时的电子密度的初始值不同,密度泛函方法也能够使初始值500、501收敛为相同的收敛值502。此外,图2的方法是在密度泛函方法中反复进行更新电子密度的计算而使电子密度收敛、也即是说利用密度泛函方法算出收敛值502的方法,因此与非专利文献1的方法相当。

[0070] 图3是表示学习电子密度预测器时算出的差量的图。预测值600表示电子密度预测器的输出。差量601表示收敛值502与预测值600的差量。差量的计算例如使用RMSE (Root Mean Square Error, 均方根误差)。在学习时,电子密度预测器的参数被更新以使预测值600与收敛值502的差量601最小化、即预测值600接近于收敛值502。此外,图3的方法是利用密度泛函方法来算出电子密度预测器的收敛值502的方法,与非专利文献2、3的方法相当,因此不同于本公开的方法。

[0071] 图4是示意性地表示将由电子密度预测器所获得的预测值600设定为密度泛函方法中的初始电子密度并通过反复进行将电子密度更新的计算从而电子密度被更新的情形。更新值700是使用预测值600进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算而得到的电子密度。

[0072] 如图2所示,在密度泛函方法中,即使在使用不同的初始值500、501的情况下,也能够使初始值500、501收敛为相同的收敛值502。由此,即使使用图4所示的预测值600作为密度泛函方法中的初始电子密度,也能够通过反复进行密度泛函方法中的更新电子密度的计算来使预测值600收敛为收敛值502。图4的方法是使用由电子密度预测器所获得的预测值600作为密度泛函方法中的初始电子密度并通过反复进行密度泛函方法中的更新电子密度的计算来获得收敛值502的方法。因此,图4的方法在利用密度泛函方法算出了收敛值502之处不同于本公开的方法。

[0073] 图5是表示使用预测值600进行一次密度泛函方法中的将电子密度更新的计算来求取更新值700而且将求出的更新值700作为监督数据而使电子密度预测器进行学习的情况的示意图。更新值700是在密度泛函方法中进行一次更新电子密度的计算而得到的电子密度,不是利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值。此外,图5与本公开的方法相当。差量800是更新值700与预测值600的差量。通过以使差量800最小化的方式将电子密度预测器的参数更新,能够使电子密度预测器学习以使得预测值600接近于更新值700。

[0074] 更新值700是通过密度泛函方法使预测值600朝向收敛值502更新的值。通过使电子密度预测器学习以使预测值600接近于更新值700,从而电子密度预测器能够输出更接近于收敛值502的预测值。

[0075] 如此,图5的方法不同于图2~图4的方法,虽然使用了密度泛函方法,但是没有通过密度泛函方法算出收敛值502,而仅限于算出更新值700。而且,将该更新值700作为监督数据而使电子密度预测器学习,以及一边反复进行密度泛函方法中的更新电子密度的计算,一边进行电子密度预测器的学习以使得预测值600慢慢接近于收敛值502。因此,能够不使用收敛值502而使电子密度预测器进行学习。其结果,进行密度泛函方法中的更新电子密度的计算的次数会减少,所以能够生成不仅能削减计算成本而且能准确地算出电子密度的电子密度预测器。

[0076] 接着,使用数式,说明本公开的方法与使用通过密度泛函方法所得到的收敛值来使电子密度预测器学习的比较例的方法相比能缩短预测器的学习完成为止的所需时间的理由。

[0077] <比较例的所需时间 $T\alpha$ >

[0078] 首先,对比较例的所需时间 $T\alpha$ 进行说明。在此,设学习数据数量为P、在学习时的一个学习数据的使用次数为Q、利用密度泛函方法求取收敛值的情况下的更新电子密度的计算次数为R。另外,设更新电子密度的计算一次的所需时间为T、每一个学习数据的电子密度预测器的学习所需要的所需时间为L。在该情况下,在预先准备利用密度泛函方法求出的收敛值作为学习数据、之后进行电子密度预测器的学习的情况下的所需时间 $T\alpha$ 如下这样计算。即,该比较例为,对于P种物质的每一种进行利用密度泛函方法的R次电子密度的更新计算而取得P个学习数据,并对于P个学习数据的每一个进行Q次电子密度预测器的学习。

[0079] 所需时间 $T\alpha = T \times R \times P + L \times Q \times P$

[0080] 右边第一项的 $T \times R \times P$ 是密度泛函方法所需要的所需时间。由于一次电子密度的更新计算的所需时间为T,电子密度的更新计算次数为R,因此一个学习数据的计算所需要的所需时间为 $T \times R$ 。由此,学习数据数量P的全部学习数据的计算所需要的所需时间为 $T \times R \times P$ 。

[0081] 在密度泛函方法中,通过求解下记的式(1)、(2)所示的Kohn-Sham方程式来算出电子密度。此外,式(1)、(2)表示于非专利文献1的式(2.8)、(2.9)。

$$[0082] \quad \left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + [\varphi(\mathbf{r}) + \mu_{xc}(n(\mathbf{r}))] \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (1)$$

$$[0083] \quad n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2)$$

[0084] 式(1)的左边基于成为计算对象的物质的原子配置以及周期结构而被定义,通过求解式(1),可求取波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 。此外,式(1)的左边的 $\varphi(\mathbf{r})$ 和 $\mu_{xc}(n(\mathbf{r}))$ 分别是与物质相应的函数。另外,式(1)的右边的 ϵ_i 是与波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 对应的轨道能量,通过求解式(1)的方程式来获得。

[0085] 电子密度 $n(\mathbf{r})$ 通过式(2)根据波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 算出。然而,式(1)左边的定义需要电子密度 $n(\mathbf{r})$,照这样,是无法求解式(1)的。于是,对电子密度 $n(\mathbf{r})$ 赋予适当的初始值,将所赋予的电子密度的初始值代入式(1),从而通过求解式(1)、(2),更新电子密度。然后,使用更新出的电子密度,再次定义式(1)的左边,更新电子密度。反复进行这种更新电子密度的计算直至电子密度 $n(\mathbf{r})$ 收敛,可求取与成为计算对象的物质的原子配置以及周期结构对应的电子密度。

[0086] “密度泛函方法中的将电子密度更新一次的计算”指的是“根据已知的电子密度和式(1)求取 $\psi_i(\mathbf{r})$,并根据求出的 $\psi_i(\mathbf{r})$ 和式(2)求取新的电子密度”。即为“使用已知的电子密度,用一次式(1)并用一次式(2),求取新的电子密度”。

[0087] 所需时间 $T\alpha$ 的第二项的 $L \times Q \times P$ 是电子密度预测器的学习所需要的所需时间。在学习过程中,由于一个学习数据的使用次数为Q,一个学习数据的学习所需要的所需时间为L,因此一个学习数据的学习的所需时间为 $L \times Q$ 。由此,P个学习数据的学习所需要的所需时间为 $L \times Q \times P$ 。

[0088] <本公开的方法的所需时间 T_{β} >

[0089] 以下的本公开的方法是将包括以下处理的一套处理反复进行 Q 次的方法:对于 P 种物质的每一种实施一次密度泛函方法中的电子密度的更新计算来取得 P 个学习数据的处理;和使学习器对 P 个学习数据的每一个学习一次的处理。即,对于每一个学习数据,进行一次电子密度的更新计算和一次学习处理,因而电子密度的更新计算次数 R 与学习数据的使用次数 Q 相等。

[0090] 因此,本公开的方法的所需时间 T_{β} 相当于在所需时间 T_{α} 中设为 $R=Q$ 时的时间,如下这样计算。

[0091] 所需时间 $T_{\beta} = (T+L) \times Q \times P$

[0092] 在此,对于一个学习数据,进行电子密度预测器的学习时,实施一次利用密度泛函方法的电子密度的更新计算。由此,对于一个学习数据,电子密度预测器的学习所需要的所需时间成为一次电子密度的更新计算的所需时间 T 与一个学习数据的学习所需要的所需时间 L 之和 $(T+L)$ 。因此,对 P 个学习数据的每一个学习 Q 次时的所需时间成为 $(T+L) \times Q \times P$ 。

[0093] <所需时间 T_{α} 和所需时间 T_{β} 的比较>

[0094] 若用所需时间 T_{α} 减去所需时间 T_{β} ,则得到下式。

[0095] $T \times (R-Q) \times P$

[0096] 由此,在密度泛函方法中的电子密度的更新计算次数 R 大于电子密度预测器的学习数据的使用次数 Q 的情况下, $T \times (R-Q) \times P$ 为正,本公开的所需时间 T_{β} 短于比较例的所需时间 T_{α} 。

[0097] 图6是表示关于使用了被称为Cifar10的自然图像数据集的分类问题而在变更了学习数据数量的情况下的学习的推移的图。在图6中,纵轴表示正解值(正确解答值)与预测值的差量,电子密度预测器的学习在该差量收敛了的情况下结束。横轴表示学习次数。在图6中,使用与5000、10000、20000、30000、40000、50000的数据大小(data size)对应的6个曲线图表示了差量逐渐收敛的情形。在此,设数据大小为表示学习数据的个数的值。

[0098] 如图6所示,可知即使将学习中的数据大小从5000到50000进行变更,到收敛为止所需的学习次数也没有大的差别。例如,假设在数据大小为50000的学习中,在学习次数为 10000×100 次处收敛了。在该情况下,学习次数由一个学习数据的使用次数 Q 与学习数据数量 P 之积表示,因此根据下式可算出使用次数 Q 为20。

[0099] $Q = 10000 \times 100 / P = 20$

[0100] 另外,因为即使学习数据数量 P 增加,收敛所需的学习次数也增加得不多,所以在上式中能够将收敛所需的学习次数(10000×100)视为是恒定的。因此,在上式中,在将学习数据数量 P 增加了的情况下,收敛所需的使用次数 Q 能够减少。

[0101] 另一方面,电子密度的更新计算次数 R 虽然也根据成为对象的物质而不同,但是平均需要40次左右的电子密度的更新计算。另外,越是进行更高精度的计算,越需要使电子密度的更新计算次数 R 增大。

[0102] 综上所述,在至少使用大于等于50000个学习数据的情况下,根据 $R=40$ 、 $Q=20$, $T \times (R-Q) \times P$ 成为正,因此,本公开的方法相比于比较例的方法能够缩短所需时间。

[0103] (实施方式1:构成的说明)

[0104] 接下来,对实施方式1的构成进行说明。以下,参照附图,详细对本公开的实施方式

1涉及的电子密度推定系统1000进行说明。图7是表示本公开的实施方式涉及的电子密度推定系统1000的构成的框图。图7所示的电子密度推定系统1000具备电子密度推定装置1001、学习数据库(DB)100、测试数据库(DB)105以及显示部107。

[0105] 电子密度推定装置1001具备数据取得部101、电子密度预测部102、电子密度更新部103、参数算出部104、电子密度推定部106以及电子密度预测器108。此外,在图7中,电子密度推定装置1001通过由CPU等处理器执行使计算机作为电子密度推定装置1001而发挥功能的电子密度推定程序来实现。另外,在图7中,学习数据库100以及测试数据库105通过非易失性的存储器构成。

[0106] 以下,记述图7所示的各构成要素的详情。

[0107] (学习数据库100)

[0108] 学习数据库100预先存储包含一个以上的物质的每一个的组成和结构等物质信息的第1输入数据。第1输入数据例如包含以晶体学通用数据格式(CIF)记载的物质信息。但是,物质信息的记载形式不限于CIF的数据格式,只要是如组成式、晶体结构、空间群以及晶格向量这样的能够实施密度泛函方法中的更新电子密度的计算的记载形式,也可以是任何记载形式。

[0109] 图9是表示以被称为CIF的形式记载的第1输入数据的一例的图。在CIF中,由组成式、单位晶格向量的长度、原子彼此间相交的角度以及单位晶格中的原子配置等描述了物质信息。在图9中,表示了关于物质“ Al_2O_3 ”的物质信息。

[0110] 图10是表示以被称为POSCAR的形式记载的第1输入数据的一例的图。在POSCAR中,由组成式、单位晶格向量以及单位晶格中的原子配置等描述了物质信息。此外,图9所示的记载内容引用自非专利文献4以及非专利文献6。

[0111] (数据取得部101)

[0112] 重新参照图7。数据取得部101从学习数据库100取得第1输入数据,并输出到电子密度预测部102和电子密度更新部103。

[0113] (电子密度预测部102)

[0114] 电子密度预测部102从数据取得部101取得第1输入数据,根据第1输入数据算出描述符。而且,电子密度预测部102将算出的描述符发送给电子密度预测器108。电子密度预测器108将描述符输入到电子密度预测器108的输入层,电子密度预测器108算出第1电子密度,从电子密度预测器108的输出层输出第1电子密度。电子密度预测器108将第1电子密度发送给电子密度预测部102。电子密度预测部102将第1电子密度输出到电子密度更新部103以及参数算出部104。

[0115] 描述符由能够根据第1输入数据算出的向量或者二维或三维矩阵来表现。描述符也可以组合构成元素的第1输入数据与元素的物性值(物理性质值)来表现。或者,如非专利文献2的图1、非专利文献3的图1所示,描述符也可以由势能构成。或者,描述符也可以由密度泛函方法中的初始电子密度构成。

[0116] 以下,针对 Al_2O_3 ,表示将第1输入数据与元素的物性值组合而表现出的描述符的一例。图20是表示关于 Al_2O_3 的单位晶格向量、原子坐标、原子序数、原子半径等的图。 Al_2O_3 的描述符是列举了 Al_2O_3 的单位晶格向量、Al原子的相对坐标、O原子的相对坐标、Al和O各自的原子序数、和原子半径的一维向量。

[0117] 例如, (Al₂O₃描述符) = (4.805027 0 0 -2.40251 4.161275 0 0 0 13.11625 0 0 0.352096 8 146.2014 0 0 0.647904 8 146.2014……)。该向量所包含的要素的排列顺序可以任意决定。

[0118] 图21是表示将第1输入数据与原子序数或者原子半径组合而表现出的铝晶体的描述符的一例等的图。例如, 如果为铝晶体, 那么认为电子密度以面心立方晶格的原子坐标为中心而按正态分布状存在, 如下式所示, 可计算24×24×24个晶胞的值。

$$[0119] \quad \text{各晶胞的值} = \sum_{d < d'} \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{d^2}{2\sigma^2}\right).$$

[0120] 其中, d = 晶胞与原子的距离, α = 原子序数, $\sigma = \frac{\text{原子半径}}{3}$, d' = 阈值

[0121] 对根据各晶胞的中心点与各原子的距离而衰减的值乘以各原子的原子序数, 并对预先确定的半径以下所包含的原子求和。对于正态分布的σ, 使用原子半径/3即可。对于预先确定的半径, 例如采用单位晶格的对角线中的最长的值即可。此外, 也可以取代原子序数而使用各原子的电负性和/或电离能。

[0122] 图12是表示初始电子密度、第1电子密度以及电子密度预测器的一例的图。

[0123] 在图1中表现了24×24×24个晶胞的电子密度。也可以认为图1表示24枚图像, 24枚图像各自表示了24×24像素。而且, 也可以认为24×24像素分别具有像素值, 一个像素的像素值对应于一个晶胞的电子密度。

[0124] 图12的电子密度预测器108的输入层的单元(unit)数也可以为24×24×24。作为图12的初始电子密度1401所示出的24枚图像的像素(个数=24×24×24)的图像值被输入到电子密度预测器108的输入层的单元中。初始电子密度1401是电子密度预测部102所生成的描述符。

[0125] 作为初始电子密度1401所示出的24枚图像的像素与电子密度预测器108的输入层的单元一对一地对应。

[0126] 图12的电子密度预测器108的输出层的单元数也可以为24×24×24。作为图12的第1电子密度1403所示出的24枚图像的像素(个数=24×24×24)的图像值被从电子密度预测器108的输出层的单元输入。

[0127] 作为第1电子密度1403所示出的24枚图像的像素与电子密度预测器108的输出层的单元一对一地对应。

[0128] 在图12中, 白色的地方表示电子密度高的地方。这在后述的图13、图14中也是相同的。初始电子密度1401是在假设电子存在于原子核附近的情况下的电子密度。在此, 作为一例, 对于Al的单晶体, 表示了将24×24×24的各晶胞的电子密度通过24×24的24枚图像来表现时的初始电子密度1401。

[0129] (电子密度预测器108)

[0130] 电子密度预测器108被输入初始电子密度1401(电子密度预测部102生成的描述符), 输出第1电子密度1403。在本例中, 电子密度预测器108也可以由非专利文献5的图2所示的神经网络构成。此外, 电子密度预测器108也可以由对24×24×24维的回归问题进行学习的随机森林(random forest)或者支持向量机构成。或者, 也可以为, 图11的描述符与初始电子密度的组(set)被输入到电子密度预测器108。电子密度推定装置1001也可以不包括

电子密度预测器108,而是外部的服务器包括电子密度预测器108。在该情况下,电子密度推定装置1001与该外部的服务器也可以以有线以及/或者无线方式进行数据的交换。

[0131] (电子密度更新部103)

[0132] 重新参照图7。电子密度更新部103从数据取得部101取得第1输入数据,从电子密度预测部102取得第1电子密度,执行使用第1输入数据和第1电子密度的数值模拟来算出第2电子密度,将第2电子密度输出到参数算出部104。

[0133] 数值模拟是使用第1输入数据和第1电子密度进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算的处理。第2电子密度是通过数值模拟更新出的电子密度。

[0134] 此外,该数值模拟也可以实施一次以上。也即是说,也可以为,首先“使用第1输入数据和第1电子密度,进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算,求取第1临时2电子密度”,接着“使用第1输入数据和第1临时2电子密度,进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算,求取第2临时2电子密度”,~,最后“使用第1输入数据和第(n-1)临时2电子密度,进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算,求取第n临时2电子密度”,将第n临时2电子密度作为上述的第2电子密度。电子密度的更新计算的次数不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。此外,n也可以小于等于5。

[0135] 通过将该数值模拟实施一次以上,能够使通过数值模拟求取的结果的稳定性提高。在通常的密度泛函方法中,记录过去5次左右的电子密度的更新历史记录,将过去的电子密度和更新后的电子密度按适当的比例相加,从而使数值模拟稳定。在本公开的方法中,也通过以5次为上限将数值模拟进行一次以上,能够实现更新电子密度时的数值模拟的稳定化。

[0136] 此外,将该数值模拟实施5次时,在至少使用250000个以上的学习数据的情况下,本公开的方法相比于比较例的方法能够使所需时间缩短。

[0137] 数值模拟的次数只要是能够使通过数值模拟求取的结果稳定、并且能够以比通过数值模拟求取极限值的时间短的时间完成数值模拟的次数即可。

[0138] 图13是表示根据第1电子密度算出第2电子密度的处理的一例的图。电子密度更新部103将第1电子密度1403代入式(1),并且将根据第1输入数据获得的 $\varphi(\mathbf{r})$ 和 $\mu_{xc}(n(\mathbf{r}))$ 代入式(1),由此求取波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 。然后,电子密度更新部103将求出的波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 代入式(2),算出可获得的电子密度 $n(\mathbf{r})$ 作为第2电子密度1501。由于式(1)中包含原子坐标,因此即使将如第1电子密度1403那样的随机的电子坐标设定为初始值,通过计算Kohn-Sham方程式,原理上也能获得如第2电子密度1501那样反映了原子坐标的电子密度。

[0139] (参数算出部104)

[0140] 重新参照图7。参数算出部104从电子密度预测部102取得第1电子密度,从电子密度更新部103取得第2电子密度。而且,参数算出部104算出作为第1电子密度与第2电子密度的差量的第1差量,算出使第1差量最小化的电子密度预测器的参数,并将算出的参数输出到电子密度推定部106。

[0141] 作为第1差量,能够采用上述的RMSE。但这仅为一例,只要是能够评价MAE (Mean Absolute Error)等误差的方法,可以使用任何方法算出第1差量。能够采用例如反向传播(back propagation)来算出使第1差量最小化的参数。基于反向传播的参数的更新算式例如由下式表示。

[0142] $W_{t+1} = W_t - \gamma dD(W_t) / dW_t$

[0143] W_t 表示参数的更新前的值, W_{t+1} 表示参数的更新后的值, $D(W_t)$ 表示第1差量, γ 表示学习系数。作为学习系数的值,没有特别限定,例如能够采用0.01。

[0144] 也可以将存储于学习数据库100的所有的第1输入数据用于基于上述更新算式的参数 W_t 的更新。或者,参数算出部104也可以如下这样一边使从学习数据库100取得的第1输入数据依次变更一边反复进行参数 W_t 的更新:从学习数据库100取得一部分第1输入数据,对于取得的一部分第1输入数据,使用上述更新算式将参数 W_t 更新后,再次从学习数据库100取得另外一部分第1输入数据。

[0145] 也可以认为参数算出部104算出使第1差量最小化的电子密度预测器108的参数是执行下述处理(P1)~(P4)来确定第k参数。

[0146] (P1)将电子密度预测部102基于第1输入数据所生成的描述符输入到被设定了第1参数的电子密度预测器108,电子密度预测器108算出并输出第1电子密度D11。

[0147] (P2)电子密度更新部103将使用密度泛函方法的更新电子密度的计算进行一次以上,算出第2电子密度。该一次以上的计算包括基于第1输入数据和第1电子密度D11的使用密度泛函方法的计算。第2电子密度不是使用密度泛函方法求出的收敛值。

[0148] (P3)将上述所生成的描述符输入到被设定了第i参数的电子密度预测器108,电子密度预测器108算出并输出第1电子密度D1i。 $i=2\sim n$, i 为自然数, n 为自然数, n 大于等于2。由此,获得第1电子密度D12~第1电子密度D1n。

[0149] (P4)参数算出部104算出作为第1电子密度D1j与第2电子密度的差量的第1差量DF1j。 j 为自然数。由此,获得第1差量DF11~第1差量DF1n。第1参数对应于第1差量DF11、~、第n参数对应于第1差量DF1n。

[0150] 参数算出部104检测第1差量DF11~第1差量DF1n中的最小的第1差量DF1k,确定与第1差量DF1k对应的第k参数。 $1\leq k\leq n$, k 为自然数。以上完成了(P1)~(P4)的说明。

[0151] 参数也可以是如下所示的。

[0152] 电子密度预测器108也可以具备输入层、一个或多个隐藏层、以及输出层。输入层、一个或多个隐藏层的每个层具有与神经元相当的多个单元。输出层具有一个或多个单元。

[0153] 对隐藏层以及输出层中的各个单元设定权值 $W_i = [w_{i1}, w_{i2}, \dots]$ 。也即是说,如果隐藏层以及输出层的单元总数为 z ,那么存在权值 $W_1 = [w_{11}, w_{12}, \dots]$ 、……、权值 $W_z = [w_{z1}, w_{z2}, \dots]$ 。当输入数据被输入到输入层的各单元时,进行使用权值 W_1 、~、权值 W_z 的运算,从输出层的一个或多个单元输出输出数据。

[0154] 上述的第1参数、~、第n参数的每一个具有与权值 W_1 、~、权值 W_z 对应的值。也即是说,第1参数为权值 $W_{11} = [w_{111}, w_{121}, \dots]$ 、……、权值 $W_{z1} = [w_{z11}, w_{z21}, \dots]$ 、~、第n参数为权值 $W_{1n} = [w_{11n}, w_{12n}, \dots]$ 、……、权值 $W_{zn} = [w_{z1n}, w_{z2n}, \dots]$ 。

[0155] (测试数据库105)

[0156] 测试数据库105预先存储包含一个以上的物质的每一个的组成和结构等物质信息的第2输入数据。第2输入数据例如以晶体学通用数据格式(CIF)记载有物质信息。但是,物质信息的记载形式不限定于CIF的数据格式,只要是如组成式、晶体结构、空间群以及晶格向量这样的能够实施利用密度泛函方法的计算的记载形式,也可以是任何记载形式。此外,与第1输入数据同样地,第2输入数据按如图9、图10所示的内容来记载。如此,第2输入数据

的记载形式与第1输入数据相同。因此,学习数据库100和测试数据库105也可以由同一数据库构建。在该情况下,也可以采用存储于该数据库的一部分输入数据作为第1输入数据、其余输入数据作为第2输入数据。

[0157] (电子密度推定部106)

[0158] 电子密度推定部106从参数算出部104取得更新后的参数,并对电子密度预测器108设定所取得的参数。而且,电子密度推定部106从测试数据库105取得第2输入数据,根据所取得的第2输入数据算出描述符。然后,电子密度推定部106将算出的描述符发送给电子密度预测器108。电子密度预测器108将描述符输入到电子密度预测器108的输入层,电子密度预测器108算出第3电子密度,并从电子密度预测器108的输出层输出第3电子密度。电子密度预测器108将第3电子密度发送给电子密度推定部106。电子密度推定部106将第3电子密度输出到显示部107。描述符和第3电子密度的算出方法与电子密度预测部102中的描述符和第1电子密度的算出方法相同。也可以将第3电子密度的算出称为第3电子密度的推定。

[0159] 图14是表示推定第3电子密度的处理的一例的图。初始电子密度1601是作为第2输入数据的描述符所得到的电子密度。通过对已学习过的电子密度预测器108输入初始电子密度1601,获得第3电子密度1602。第3电子密度1602与初始电子密度1601不同,此前局部存在于各图像的中心及4个角落的电子密度减少,取而代之地出现了非局部存在于中心及4个角落的中间位置的电子密度,可知准确地推定出了电子密度。

[0160] (显示部107)

[0161] 显示部107例如由液晶面板等显示装置构成,显示表示电子密度推定部106推定出的第3电子密度的图像。显示部107是输出第3电子密度的输出部的一例。作为表示第3电子密度的图像,例如可以采用图14所示的显示第3电子密度1602的图像,也可以采用显示表示第3电子密度的数值组群的图像。

[0162] 图8是表示图7的电子密度更新部103的详细构成的框图。图8所示的电子密度更新部103具备模拟参数设定部200、电子密度设定部201以及更新计算部202。

[0163] 以下,记述图8所示的各构成要素的详情。

[0164] (模拟参数设定部200)

[0165] 模拟参数设定部200从数据取得部101取得第1输入数据,将其设定为数值模拟的计算条件。由此,式(1)的例如 $\phi(\mathbf{r})$ 和 $\mu_{xc}(n(\mathbf{r}))$ 的函数被设定。

[0166] (电子密度设定部201)

[0167] 电子密度设定部201从电子密度预测部102取得第1电子密度,将其设定为数值模拟的初始电子密度。由此,式(1)中的电子密度 $n(\mathbf{r})$ 被设定。

[0168] (更新计算部202)

[0169] 更新计算部202将密度泛函方法中的更新电子密度的计算进行一次以上,更新初始电子密度,算出第2电子密度,将算出的第2电子密度输出到参数算出部104。由此,进行一次以上的使用式(1)、式(2)的更新计算,如图13所示那样,根据第1电子密度1403算出第2电子密度1501。此外,更新计算的次数不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。

[0170] (实施方式1:工作的说明)

[0171] 接着,对电子密度推定装置1001的工作进行说明。

[0172] (流程图)

[0173] 图15是表示本公开的实施方式1中的电子密度推定装置1001的处理的整体流程的流程图。

[0174] (步骤S100)

[0175] 数据取得部101从学习数据库100取得第1输入数据,将取得的第1输入数据输出到电子密度预测部102和电子密度更新部103。

[0176] (步骤S101)

[0177] 电子密度预测部102根据第1输入数据算出描述符,将算出的描述符发送给电子密度预测器108。电子密度预测器108算出第1电子密度,并发送给电子密度预测部102。电子密度预测部102将第1电子密度输出到电子密度更新部103。

[0178] (步骤S102)

[0179] 电子密度更新部103通过使用在步骤S100中取得的第1输入数据和在步骤S101中算出的第1电子密度进行利用密度泛函方法的数值模拟来算出第2电子密度,并输出到参数算出部104。在此,设为电子密度更新部103在步骤S100~步骤S104的一个循环(loop)中进行一次数值模拟的计算。也即是说,进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算。在该情况下,如果步骤S100~步骤S104的循环数为 k (k 为1以上的整数),那么数值模拟的总次数为 k 次。更新计算的总次数 k 不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。但这仅为一例,电子密度更新部103也可以在一个循环中实施 m (m 为多个)次数值模拟的计算。也即是说,也可以将密度泛函方法中的更新电子密度的计算实施 m 次。在该情况下,数值模拟的总次数为 $k \times m$ 。更新计算的总次数 $k \times m$ 不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。

[0180] (步骤S103)

[0181] 参数算出部104根据第1电子密度和第2电子密度算出第1差量,使用反向传播等方法将电子密度预测器108的参数 W_t 更新以使得第1差量最小。

[0182] (步骤S104)

[0183] 参数算出部104在参数的更新次数超过了预定的次数的情况下(步骤S104:是),将更新出的参数输出到电子密度推定部106,使处理前进至步骤S105。由此,获得电子密度预测器的将参数 W_t 最小化的学习完的参数,电子密度预测器的学习结束。

[0184] 另一方面,参数算出部104在参数的更新次数没有超过预定的次数的情况下(步骤S104:否),使处理返回至步骤S100,重复进行步骤S100至步骤S103的处理。在此,作为预定的次数,如在图6中说明的那样,能够采用从用于电子密度预测器108的学习的第1输入数据的数量预见第1差量收敛的预先确定的次数。但这仅为一例,也可以反复进行步骤S100至步骤S103的处理直到第1差量收敛为预定的值以下为止。

[0185] (步骤S105)

[0186] 电子密度推定部106从参数算出部104取得已学习完的参数,将取得的参数设定于电子密度预测器108。而且,电子密度推定部106从测试数据库105取得第2输入数据,根据取得的第2输入数据算出描述符,并将算出的描述符发送给电子密度预测器108。电子密度预测器108算出第3电子密度,将第3电子密度发送给电子密度推定部106。电子密度推定部106将第3电子密度输出到显示部107。

[0187] 图16是对图15的步骤S102中的电子密度更新部103的处理的详情进行说明的流程

图。

[0188] (步骤S200)

[0189] 电子密度更新部103的模拟参数设定部200将从数据取得部101取得的第1输入数据设定为密度泛函方法的计算条件。在此,作为计算条件,可列举式(1)所示的 $\varphi(\mathbf{r})$ 和 $\mu_{xc}(n(\mathbf{r}))$,这些函数根据第1输入数据来算出,并设定于式(1)。

[0190] (步骤S201)

[0191] 电子密度设定部201将从电子密度预测部102取得的第1电子密度设定为密度泛函方法的初始电子密度。由此,作为式(1)的电子密度 $n(\mathbf{r})$ 的初始值,设定从电子密度预测器所得到的第1电子密度,能够求解式(1)的方程式,能够算出波函数 $\psi_i(\mathbf{r})$ 以及轨道能量 ε_i 。

[0192] (步骤S202)

[0193] 更新计算部202将密度泛函方法中的更新电子密度的计算进行一次以上,将设定为初始电子密度的第1电子密度更新来算出第2电子密度,并输出到参数算出部104。更新计算的次数不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。

[0194] 如上,电子密度更新部103通过进行步骤S200至步骤S202的处理来算出第2电子密度。

[0195] 如上所述,根据本实施方式,能够使用通过数值模拟的一次以上的电子密度的更新计算所得到的更新值、即第2电子密度作为学习数据而使电子密度预测器学习。更新计算的次数不是利用密度泛函方法求取电子密度的极限值的次数。因此,本构成能够不使用利用密度泛函方法求出的电子密度的收敛值而使电子密度预测器进行学习。其结果,无需花费大量的时间和劳力就能够准备学习数据,能够使生成电子密度预测器所需要的成本降低。

[0196] (实施方式2)

[0197] 实施方式2是在第1电子密度在某种程度上接近第2电子密度之前使数值模拟跳过(skip)、且在第1电子密度在某种程度上接近第2电子密度之时使第2电子密度更新的实施方式。此外,在本实施方式中,对与实施方式1相同的构成要素附加相同的标号,并省去说明。

[0198] 图17是对本公开的实施方式2的处理进行说明的图。图17示意性地表示了第2差量1703小于第3差量1704的状态下的第1电子密度、第4电子密度与第5电子密度的距离关系。此外,在图17中,纵轴和横轴与图2相同。

[0199] 第4电子密度1700是电子密度预测器在最后实施数值模拟时输出的第1电子密度。第1电子密度1702是当前的电子密度预测器的输出。第2差量1703是第1电子密度1702与第4电子密度1700的差量,表示相对于学习进度的电子密度预测器的输出的变动。第3差量1704是第5电子密度与第1电子密度1702的差量,与第2差量1703同样,表示相对于学习进度的电子密度预测器的输出的变动。

[0200] 第5电子密度1701是通过将第4电子密度1700作为初始电子密度的数值模拟所更新出的第2电子密度。从第4电子密度1700观察,第5电子密度1701位于收敛值1705侧。因此,第5电子密度1701表示从第4电子密度1700观察时的收敛值1705的大致方向。由此,通过将第5电子密度1701作为监督数据来使电子密度预测器学习,能够朝向收敛值1705使电子密度预测器学习。此外,收敛值1705是在密度泛函方法中反复进行更新电子密度的计算而使

电子密度收敛后的值。

[0201] 在第2差量1703小于第3差量1704的状态下,从第4电子密度1700向第5电子密度1701的方向H1与从第1电子密度1702向第5电子密度1701的方向H2大致一致。因此,在该状态下,通过以使第3差量1704最小化的方式更新电子密度预测器的参数,能够使作为电子密度预测器的输出的第1电子密度1702接近收敛值1705。此时,在本实施方式中,由于跳过了数值模拟,因此能够减少计算时间。

[0202] 图18是对本公开的实施方式2的处理进行说明的图。图18是示意性地表示在图17中即使变为第2差量1703大于第3差量1704的状态也不实施数值模拟而继续进行电子密度预测器的学习的情况下的第1电子密度、第4电子密度与第5电子密度的距离关系的图,表示了本公开的比较例。此外,在图18中,纵轴和横轴与图2相同。

[0203] 如图18所示,即使成为了第2差量1703大于第3差量1704的状态,若不通过数值模拟使第2电子密度更新,而继续进行将第5电子密度1701作为监督数据的电子密度预测器的学习,会变得不能说方向H2与方向H1一致。

[0204] 于是,在本实施方式中,当第2差量1703变得大于第3差量1704、即与第4电子密度1700相比第1电子密度1702更接近于第5电子密度1701侧时,参数算出部104实施数值模拟。由此,将第2电子密度1706更新,将更新后的第2电子密度设定为第5电子密度,实施电子密度预测器的学习。即,当方向H2和方向H1的朝向分离开时,能够将第2电子密度1706更新并使方向H2朝向收敛值1705的方向而使电子密度预测器学习。其结果,能够实现高效的学习。

[0205] 图19是表示本公开的实施方式2涉及的处理的一例的流程图。以下,使用图19,对跳过数值模拟并且使电子密度预测器学习的处理进行说明。

[0206] 步骤S300至步骤S301的处理与图15的步骤S100至S101的处理相同,因此省去说明。

[0207] (步骤S302)

[0208] 电子密度更新部103判定对于第1输入数据是否已经实施了数值模拟。在尚未实施数值模拟的情况下(步骤S302:否),处理前进至步骤S303,在实施了数值模拟的情况下(步骤S302:是),处理前进至步骤S305。在此,作为在步骤S302中判定为“否”的实例,一次都没有实施基于密度泛函方法的数值模拟的实例相符,例如在图19的流程刚刚开始之后。

[0209] (步骤S303)

[0210] 电子密度更新部103将在S301中算出的第1电子密度设定为密度泛函方法的初始电子密度,并且将在算出第1电子密度时输入到电子密度预测器的第1输入数据设定为密度泛函方法的计算条件而执行基于密度泛函方法的数值模拟,算出第2电子密度。在此,设为电子密度更新部103在步骤S100~步骤S104的一个循环中进行一次数值模拟的计算。也就是说,进行一次密度泛函方法中的更新电子密度的计算。但这仅为一例,该计算也可以在一个循环中执行多次。

[0211] (步骤S304)

[0212] 电子密度更新部103将最后的数值模拟、即在步骤S303的处理中算出第2电子密度时所使用了的第1电子密度作为第4电子密度记录于存储器。另外,电子密度更新部103将最后的数值模拟、即执行了步骤S303的处理时所得到的第2电子密度作为第5电子密度记录于存储器。

[0213] (步骤S305)

[0214] 电子密度更新部103算出作为第1电子密度与第4电子密度的差量的第2差量。另外,参数算出部104算出作为第1电子密度与第5电子密度的差量的第3差量。在此,第1电子密度指的是在步骤S301中算出的最新的第1电子密度。在此,第2差量以及第3差量与第1差量同样,例如能够采用RMSE。但这仅为一例,只要是能够评价MAE (Mean Absolute Error) 等误差的方法,可以使用任何方法算出第2差量以及第3差量。

[0215] (步骤S306)

[0216] 参数算出部104判定第2差量是否大于第3差量。如果第2差量大于第3差量(步骤S306:是),则处理前进至步骤S303,如果第2差量在第3差量以下(步骤S306:否),则处理前进至步骤S307。在此,第2差量大于第3差量这一条件相当于预定条件的一例。

[0217] (步骤S307)

[0218] 在第2电子密度刚刚在步骤S304中被更新后,与步骤S103同样地,参数算出部104算出该第2电子密度(第5电子密度)与在该第2电子密度的算出中使用了的第1电子密度(第4电子密度)的第1差量,将电子密度预测器的参数 W_t 更新以使得第1差量最小。

[0219] 另一方面,参数算出部104在不是第2电子密度刚刚被更新后的情况下,将电子密度预测器的参数 W_t 更新以使得在步骤S305中算出的第3差量最小。

[0220] 步骤S308至步骤S309的处理与图15的步骤S104至步骤S105的处理相同,因此省去说明。

[0221] 接着,对图19的流程的概要进行说明。首先,流程开始时,由于尚未实施数值模拟,因此在步骤S302中判定为“否”,并在步骤S303中实施数值模拟而算出第2电子密度。之后,到第2差量大于第3差量为止,反复进行S302“是”→S305→S306“否”→S307→S308“否”的循环,实施电子密度预测器的学习。由此,第1电子密度接近于在最后的数值模拟中算出的第2电子密度、即第5电子密度。而且,当第2差量大于第3差量时,在步骤S306中判定为“是”,第2电子密度通过步骤S304的数值模拟被更新。之后,到第2差量大于第3差量为止,反复进行S302“是”→S305→S306“否”→S307→S308“否”的循环。

[0222] 如此,在本流程中,第2差量小于第3差量的情况下跳过数值模拟,继续进行电子密度预测器的学习,并在第2差量变得大于第3差量的时间点,实施数值模拟而更新第2电子密度。因此,在本实施方式中,相比于采用每当第1电子密度被更新时就执行数值模拟的方式的情况,能够缩短电子密度预测器的学习花费的时间。

[0223] (实施方式2的变形例)

[0224] 在实施方式2中,第2差量变得大于第3差量时更新第2电子密度,但本公开不限于此。例如,也可以在第2差量变得大于从第3差量减去预定值后的值时更新第2电子密度。或者,例如也可以在第2差量变得大于对第3差量加上预定值后的值时更新第2电子密度。

[0225] 以上,基于实施方式对本公开涉及的电子密度推定装置1001进行了说明,但本公开并非限定于这些实施方式。只要不脱离本公开的宗旨,对本实施方式实施本领域技术人员想到的各种变形而得到的方式、组合不同的实施方式中的构成要素而构建的方式等也可以包含在本公开的范围內。

[0226] (硬件构成)

[0227] 上述的电子密度推定装置1001具体来说也可以由计算机系统构成,该计算机系统

由微处理器、ROM、RAM、硬盘驱动器、显示器单元、键盘以及鼠标等构成。RAM或者硬盘驱动器中存储有电子密度推定程序。微处理器按照电子密度推定程序进行工作,由此,电子密度推定装置1001实现其功能。在此,电子密度推定程序是为了实现预定的功能而组合多个表示针对计算机的指令的命令码而构成的。

[0228] 再者,构成上述的电子密度推定装置1001的构成要素的一部分或全部也可以由一个系统LSI (Large Scale Integration:大规模集成电路) 构成。系统LSI是将多个构成部集成到一个芯片上而制造出的超多功能LSI,具体而言是构成为包括微处理器、ROM、RAM等的计算机系统。RAM中存储有计算机程序。微处理器按照计算机程序进行工作,由此,系统LSI实现其功能。

[0229] 再另外,构成上述的电子密度推定装置1001的构成要素的一部分或全部也可以由可装卸于计算机的IC卡或单体模块构成。IC卡或模块是由微处理器、ROM以及RAM等构成的计算机系统。IC卡或模块也可以包括上述的超多功能LSI。微处理器按照计算机程序进行工作,由此,IC卡或模块实现其功能。该IC卡或该模块可以具有防篡改性能。

[0230] 另外,本公开也可以作为是由上述的电子密度推定装置1001执行的电子密度推定方法。另外,该电子密度推定方法可以通过计算机执行电子密度推定程序来实现,也可以由包括电子密度推定程序的数字信号实现。

[0231] 再者,本公开也可以将电子密度推定程序或者上述数字信号记录于计算机可读的非瞬时性的记录介质而构成。作为记录介质,例如为软盘、硬盘、CD-ROM、MO、DVD、DVD-ROM、DVD-RAM、BD (Blu-ray (注册商标) Disc)、半导体存储器等。另外,电子密度推定程序也可以通过记录于非瞬时性的记录介质的上述数字信号构成。

[0232] 另外,本公开也可以通过将上述电子密度推定程序或者上述数字信号经由电通信线路、无线或有线通信线路、以互联网为代表的网络、数据广播等进行传输来构成。

[0233] 另外,本公开也可以设为是具备微处理器和存储器的计算机系统,上述存储器存储有电子密度推定程序,微处理器按照电子密度推定程序进行工作。

[0234] 另外,也可以通过将电子密度推定程序或者上述数字信号记录于上述非瞬时性的记录介质而输送,或者将电子密度推定程序或者上述数字信号经由上述网络等而输送,从而由其他独立的计算机系统实施。

[0235] 另外,本电子密度推定系统也可以由服务器和经由网络与服务器连接的用户所持有的终端构成。在该情况下,在图7中,电子密度推定装置1001、学习数据库100以及测试数据库105通过服务器构成,显示部107通过终端构成。电子密度推定部106在经由网络从终端取得对于预定物质的电子密度的算出请求时,从测试数据库105取得相符的物质的第2输入数据,将该第2输入数据输入到已学习过的电子密度预测器,由此推定相符的物质的电子密度。然后,服务器使用通信装置将推定出的电子密度发送到终端,使终端的显示部107显示即可。

[0236] 产业上的可利用性

[0237] 根据本公开,即使没有学习数据也能够使电子密度预测器进行学习,对于在无法准备大规模的学习数据的状况下要预测未知材料的特性的情况是有用的。

[0238] 标号说明

[0239] 100学习数据库;101数据取得部;102电子密度预测部;103电子密度更新部;104参

数算出部;105测试数据库;106电子密度推定部;108电子密度预测器;1000电子密度推定系统;1001电子密度推定装置。

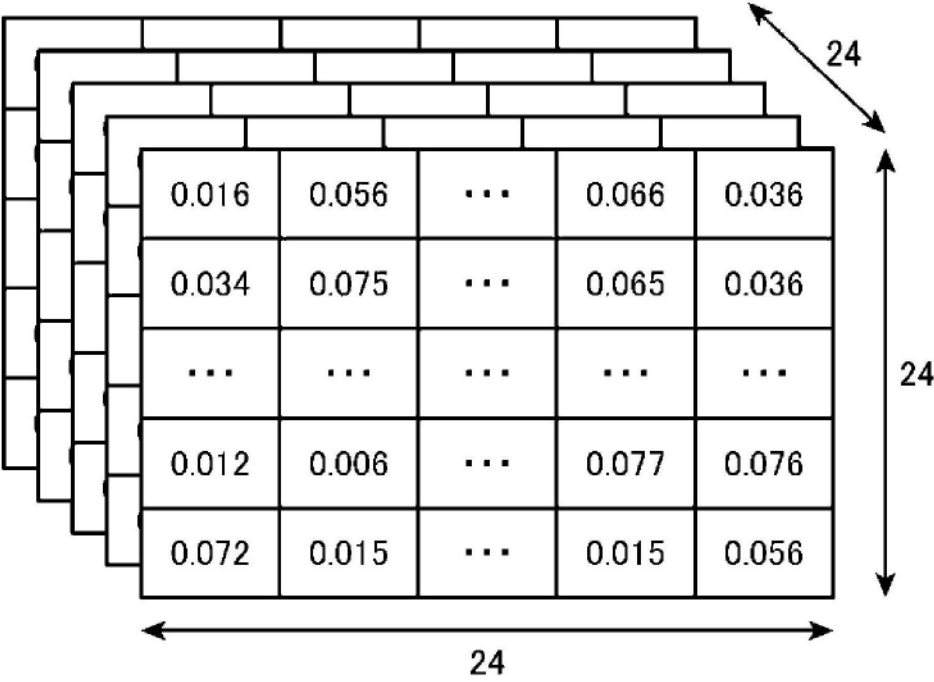


图1

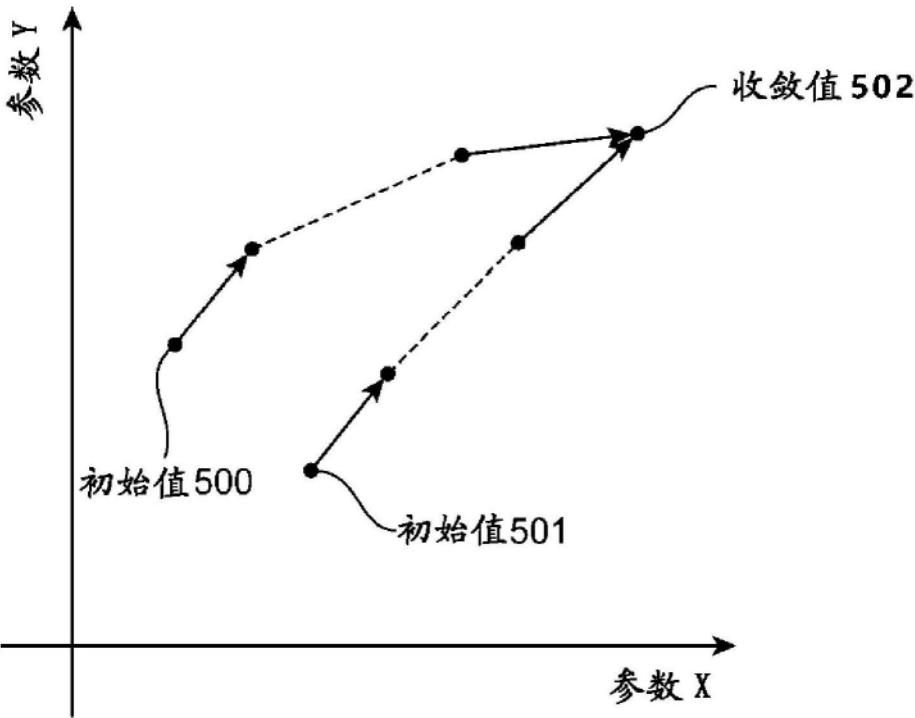


图2

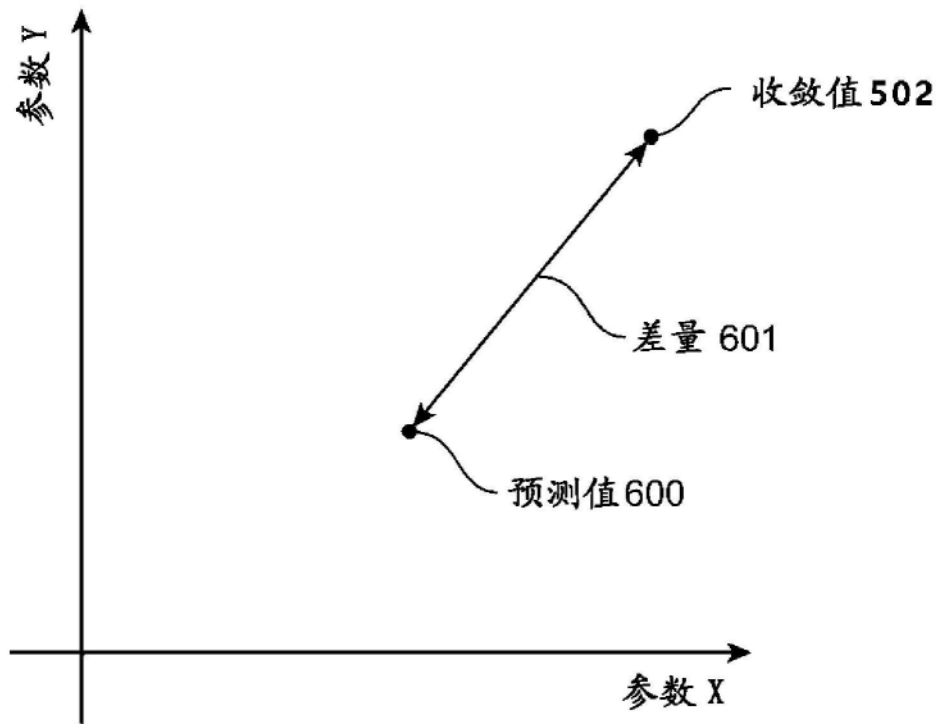


图3

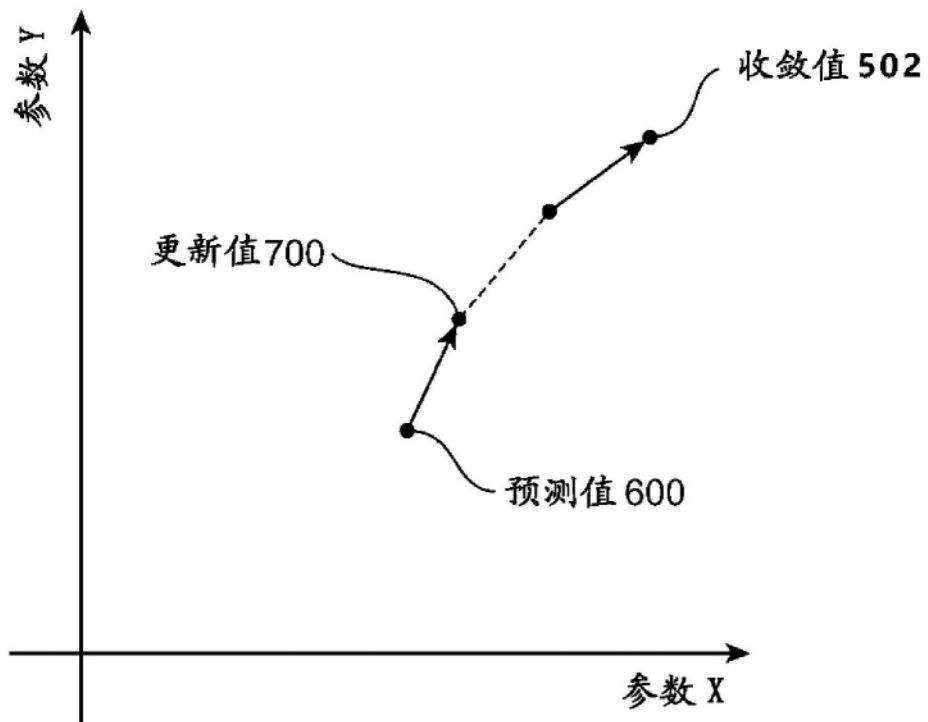


图4

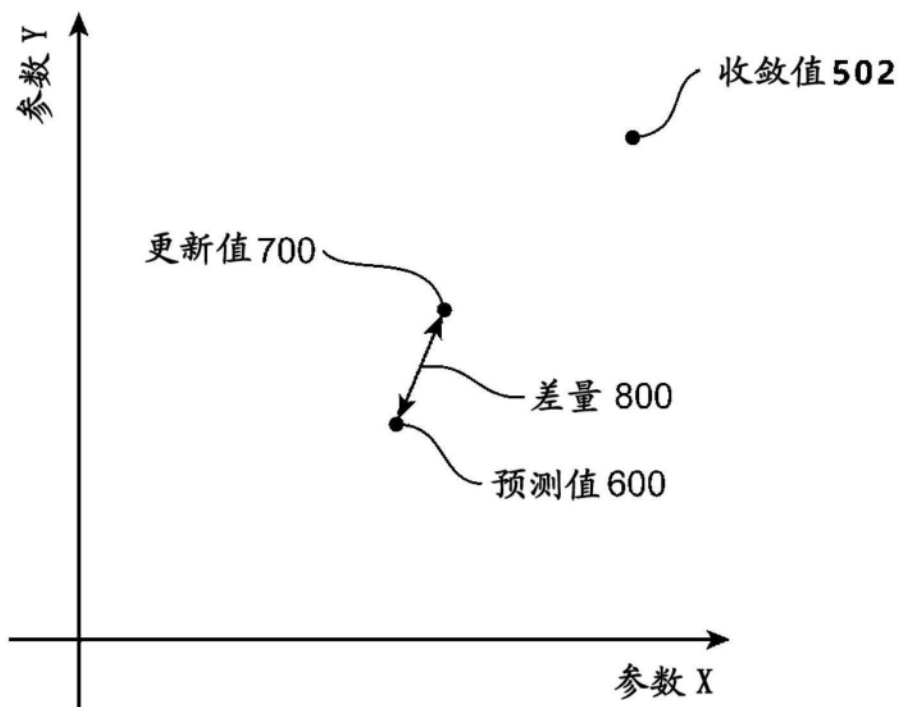


图5

每个学习数据数量的学习的推移

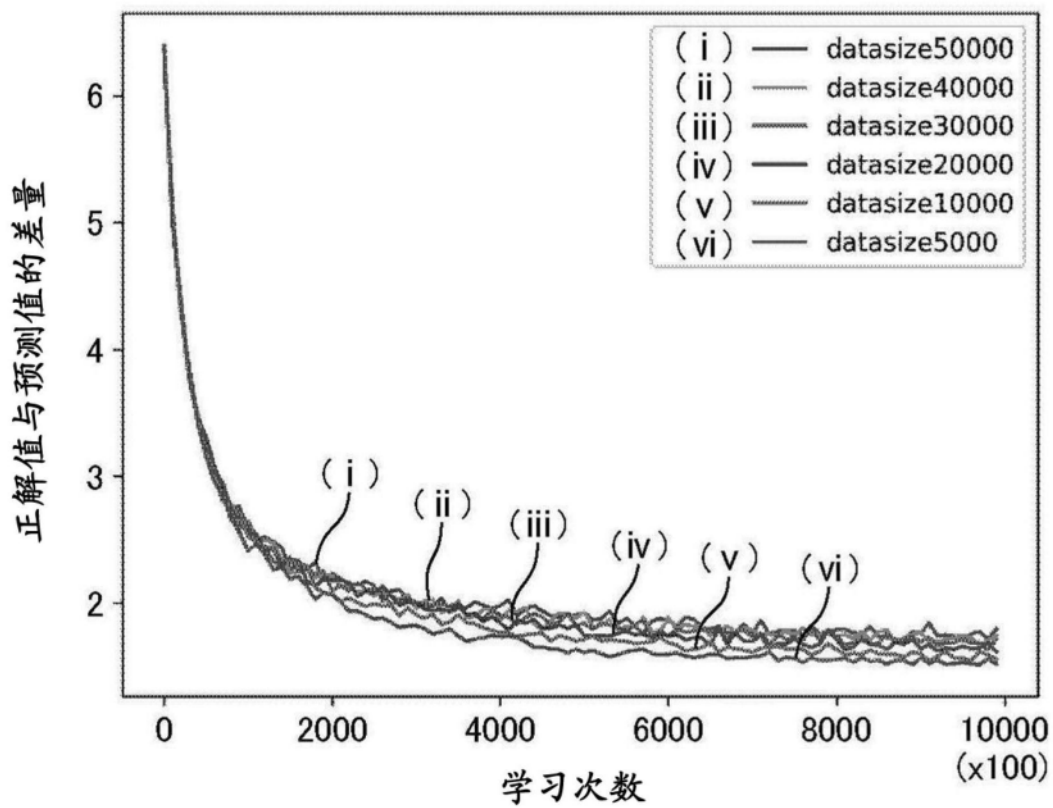


图6

1000

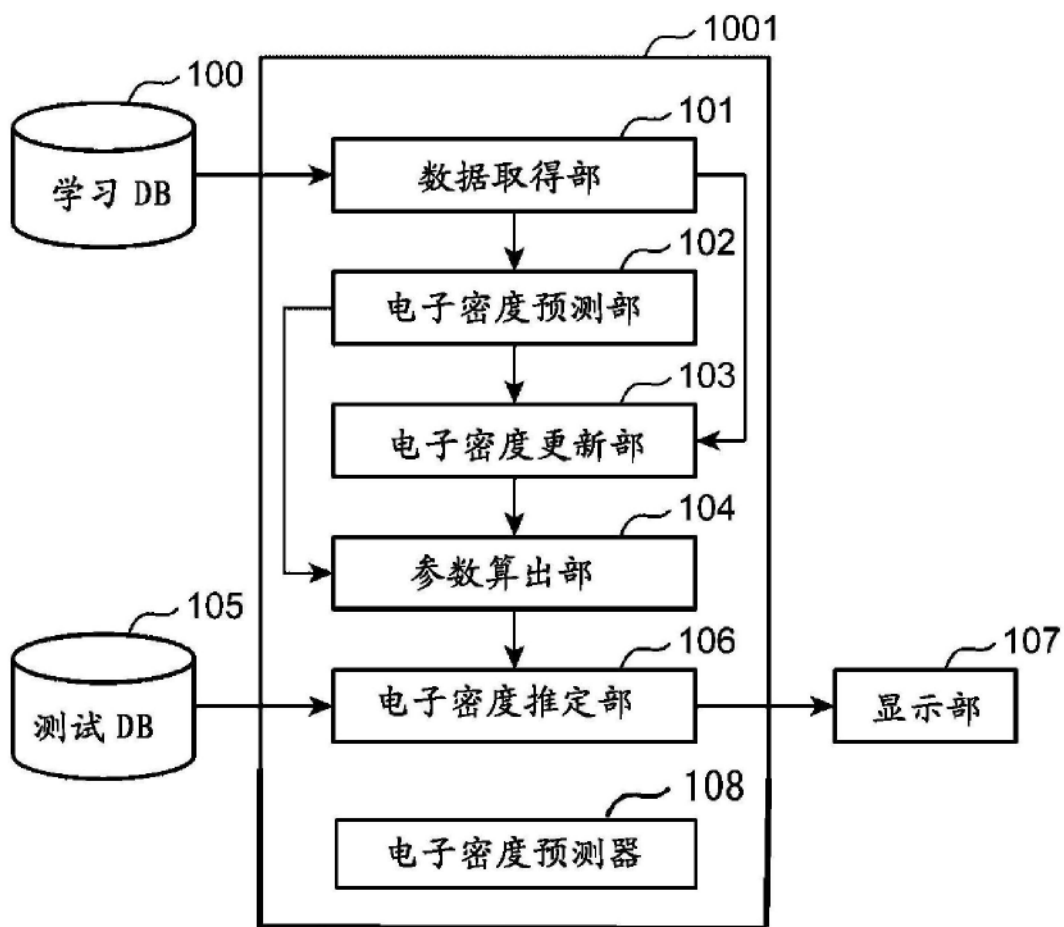


图7

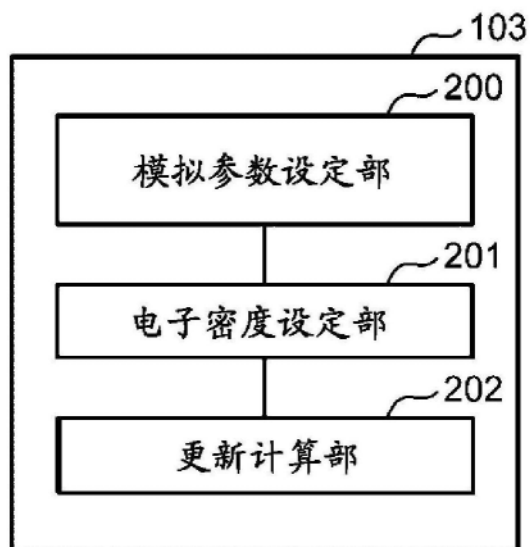


图8

<pre> #(C) 2017 by FIZ Karlsruhe - Leibniz Institute for Information Infrastructure. All rights reserved. data_9770-ICSD _database_code_ICSD 9770 _audit_creation_date 1984-09-04 _audit_update_record 2012-02-01 _chemical_name_systematic 'Aluminium oxide - Cr-doped' _chemical_formula_structural 'Al2 O3' _chemical_formula_sum 'Al2 O3' _chemical_name_structure_type Corundum-Al2O3 _chemical_name_mineral Corundum _exptl_crystal_density_diffrn 3.98 _cell_measurement_pressure 1000. _publ_section_title 'Crystal structure and compression of ruby to 46 kbar' loop_ _citation_id _citation_journal_full _citation_year _citation_journal_volume _citation_page_first _citation_page_last _citation_journal_id_ASTM primary 'Journal of Applied Physics' 1978 49 5823 5826 JAP1AU loop_ _publ_author_name 'Finger, L.W.' 'Hazen, R.M.' _cell_length_a 4.7607(9) _cell_length_b 4.7607(9) _cell_length_c 12.9947(17) _cell_angle_alpha 90. _cell_angle_beta 90. _cell_angle_gamma 120. _cell_volume 255.06 _cell_formula_units_Z 6 </pre>	<pre> _symmetry_space_group_name_H-M 'R -3 c H' _symmetry_Int_Tables_number 167 _refine_ls_R_factor_all 0.03 loop_ _symmetry_equiv_pos_site_id _symmetry_equiv_pos_as_xyz 1 'x-y, -y, -z+1/2' 2 '-x, -x+y, -z+1/2' (中略) 35 '-y+1/3, x-y+2/3, z+2/3' 36 'x+1/3, y+2/3, z+2/3' loop_ _atom_type_symbol _atom_type_oxidation_number Al3+ 3 O2- -2 loop_ _atom_site_label _atom_site_type_symbol _atom_site_symmetry_multiplicity _atom_site_Wyckoff_symbol _atom_site_fract_x _atom_site_fract_y _atom_site_fract_z _atom_site_B_iso_or_equiv _atom_site_occupancy _atom_site_attached_hydrogens Al1 Al3+ 12 c 0 0.35216(8) 0.31(4) 1. 0 O1 O2- 18 e 0.3061(5) 0 0.25 0.33(5) 1. 0 #End of TTdata_9770-ICSD </pre>
---	---

Finger, L. W., & Hazen, R. M. (1978). Crystal structure and compression of ruby to 46 kbar. *Journal of Applied Physics*, 49(12), 5823–5826.

图9

```
Al4 O6
1.0
-2.380350 -4.122887 -0.000000
2.380350 -4.122887 -0.000000
-0.000000 -2.748591 4.331567
Al O
4 6
direct
0.852160 0.852160 0.443520 Al3+
0.352160 0.352160 0.943520 Al3+
0.147840 0.147840 0.556480 Al3+
0.647840 0.647840 0.056480 Al3+
0.443900 0.056100 0.750000 O2-
0.056100 0.750000 0.750000 O2-
0.750000 0.443900 0.750000 O2-
0.943900 0.250000 0.250000 O2-
0.250000 0.556100 0.250000 O2-
0.556100 0.943900 0.250000 O2-
```

图10

组成式	原子序数的平均	原子半径的平均	体积的平均	原子序数的平均	原子序数的方差	原子半径的方差	体积的方差	...
S2.0Hf4.0	53.33	136.67	23.90	...	26.40	25.93	2.31	...
Nb8.0Co2.0Si2.0	34.17	137.50	17.17	...	10.37	12.83	2.86	...
P4.0Mo12.0	35.25	133.75	18.68	...	11.69	19.49	5.50	...
Tl1.0Te2.0Ag1.0	58.00	157.50	28.41	...	13.44	20.46	6.89	...
Ge1.0Ca7.0	21.50	173.13	40.40	...	3.97	18.19	6.71	...
Te4.0Ga4.0	41.50	135.00	26.78	...	10.50	5.00	7.17	...
Si2.0Co2.0Al1.0	19.00	123.00	15.72	...	6.54	11.22	4.06	...
Sn1.0	33.00	122.50	27.07	...	17.00	22.50	0.10	...
S2.0Ta1.0	35.00	115.00	24.13	...	26.87	21.21	4.30	...
Si1.0Os1.0	45.00	120.00	17.00	...	31.00	10.00	3.02	...

图11

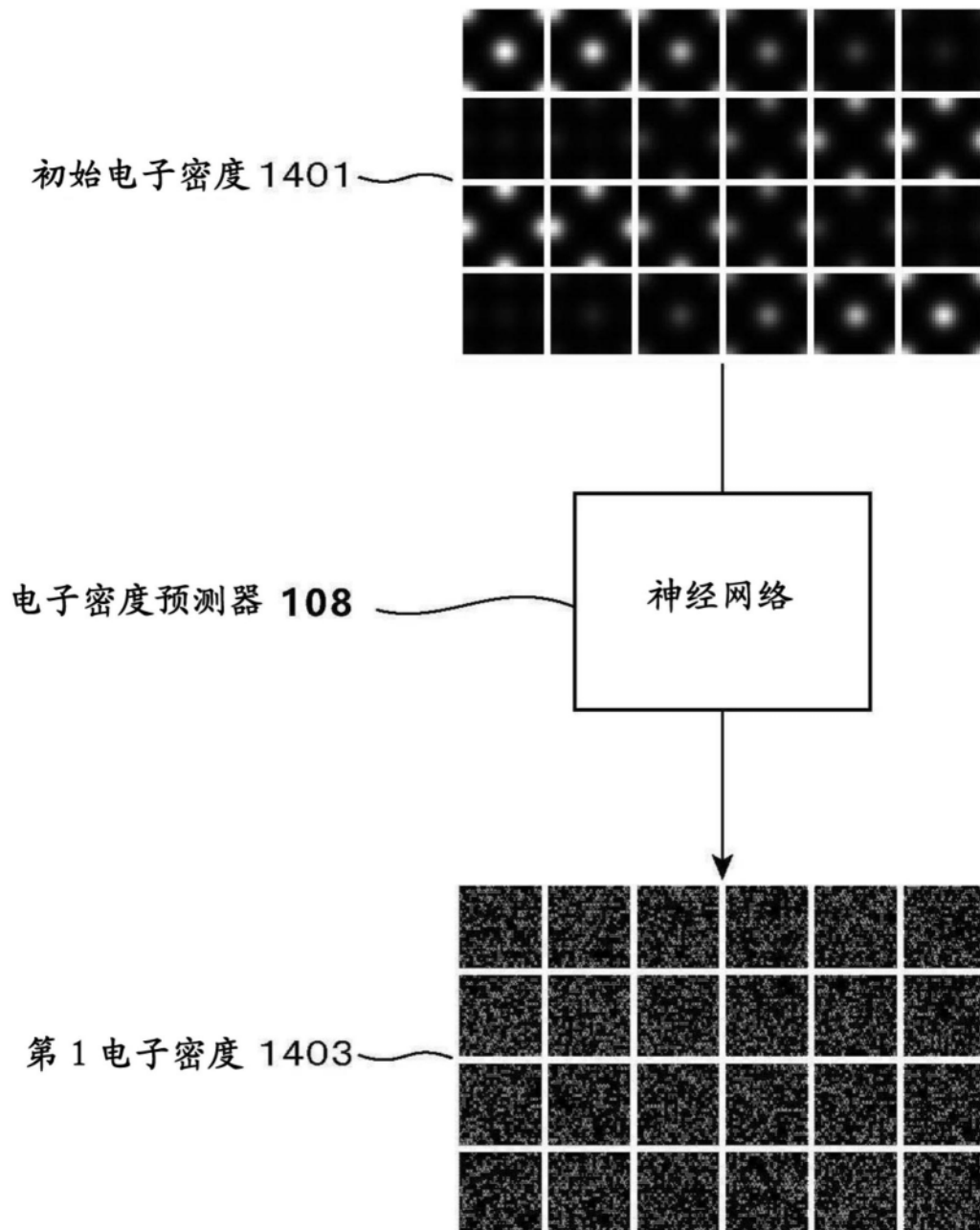


图12

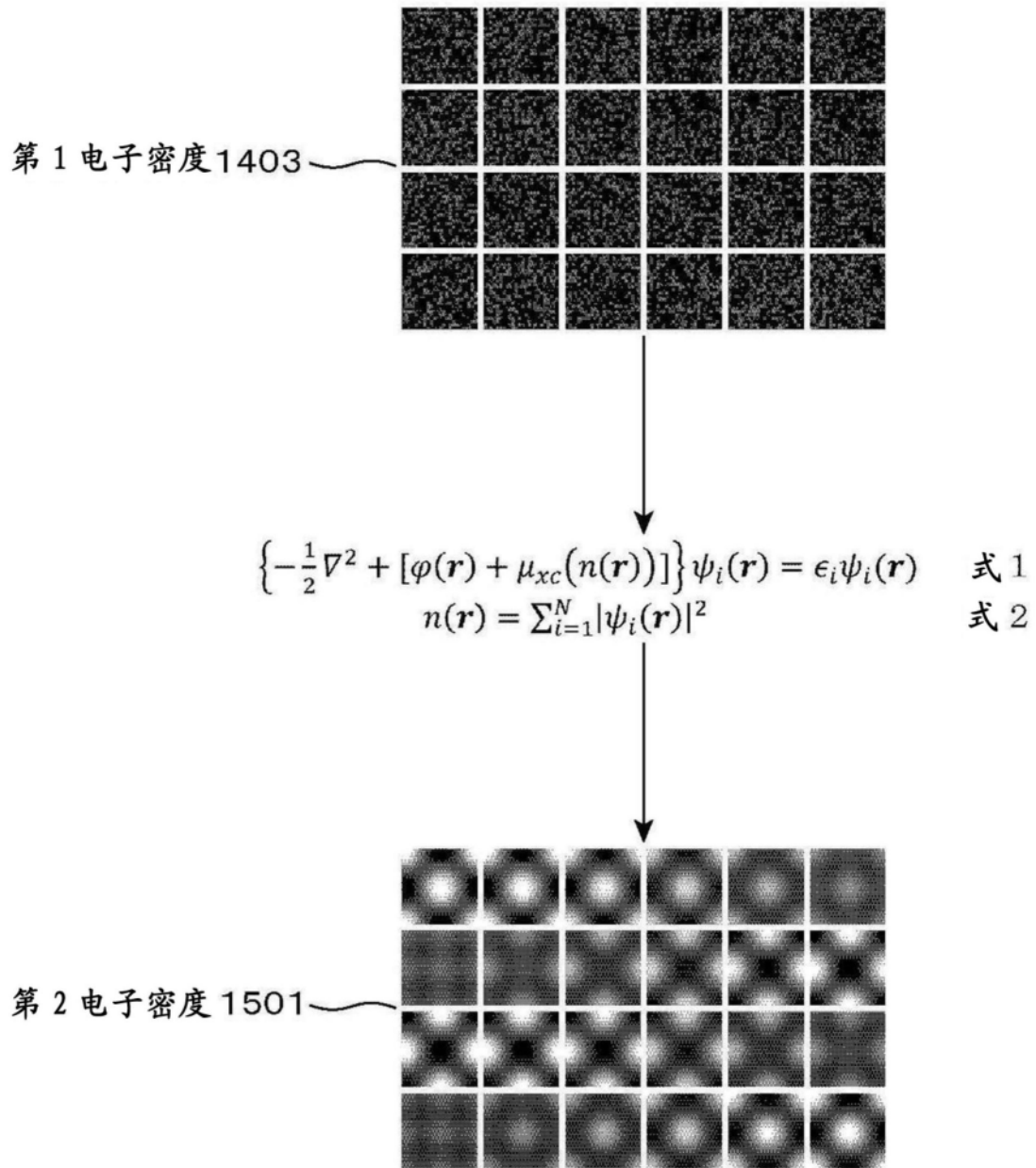


图13

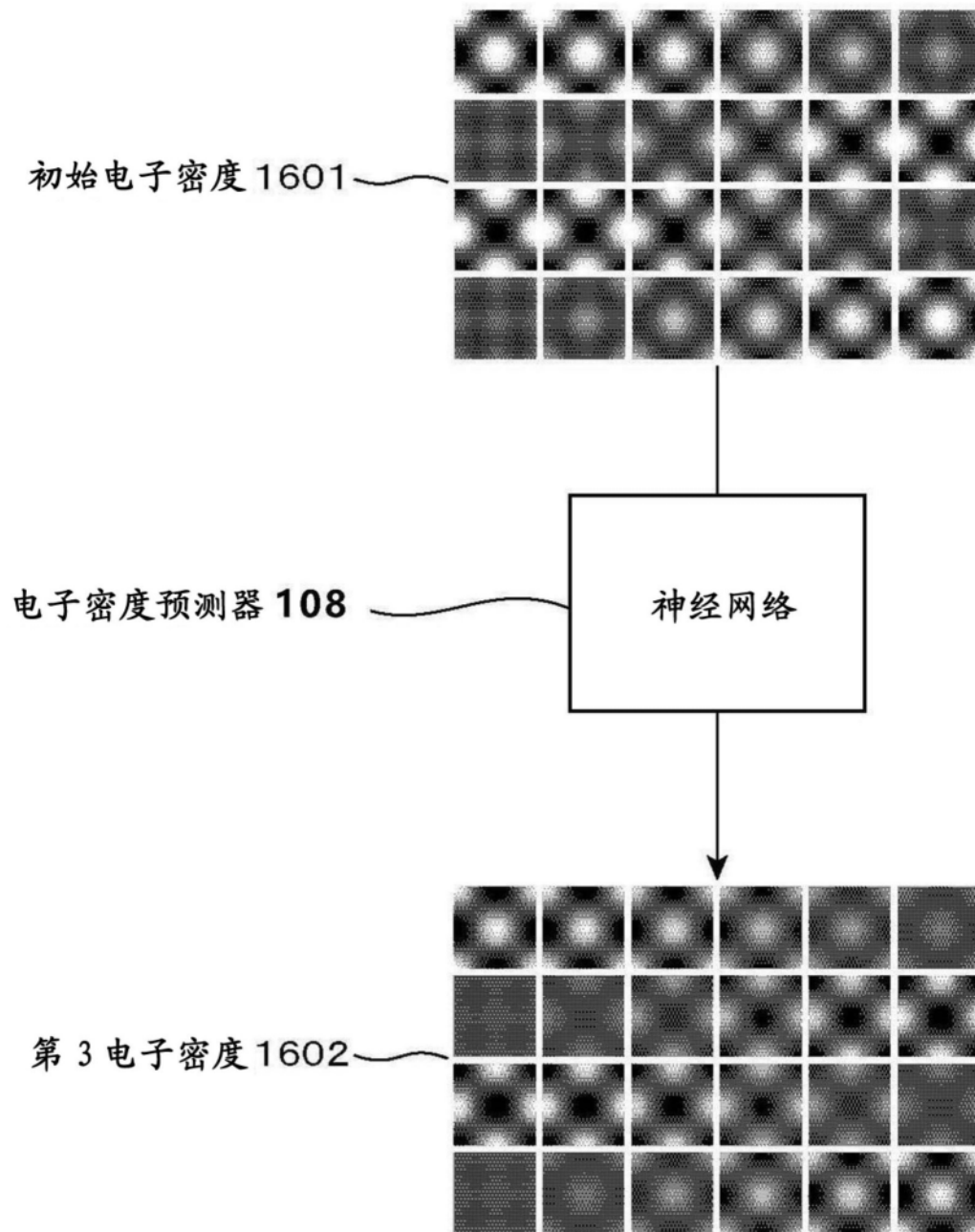


图14

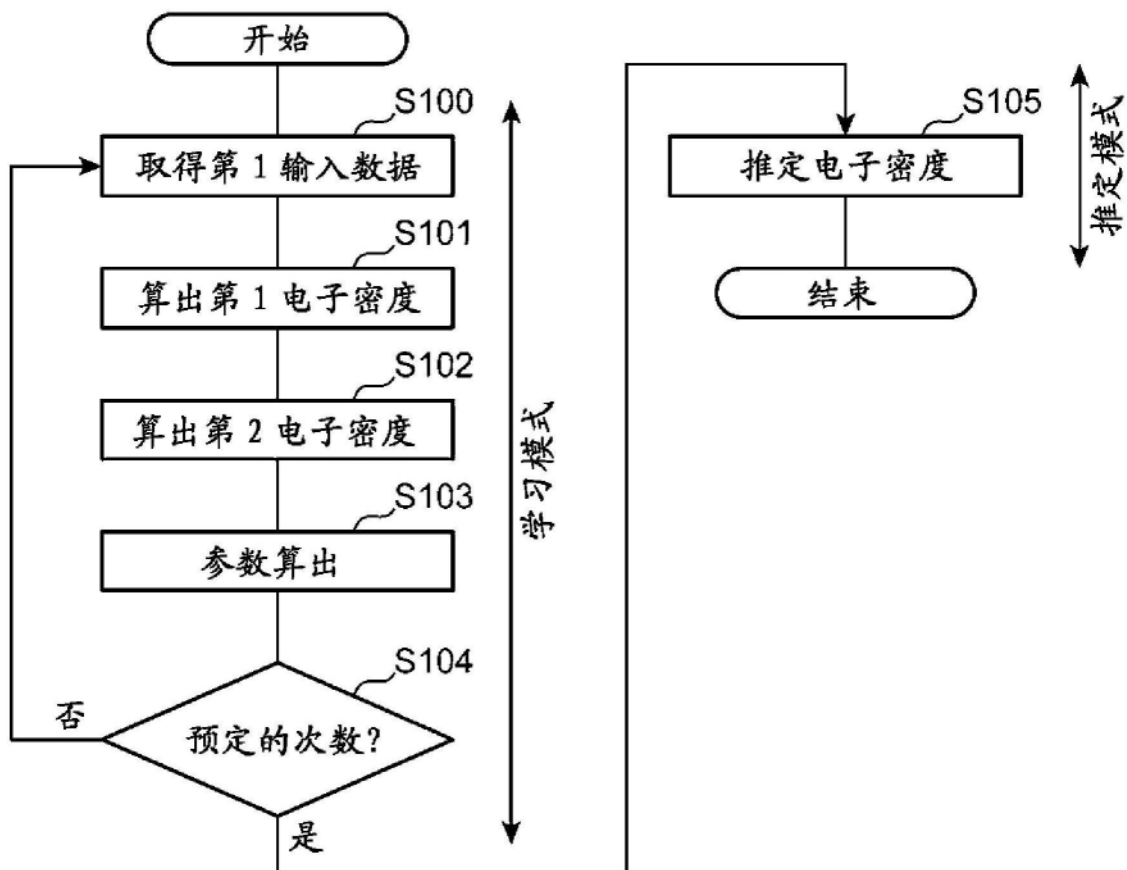


图15

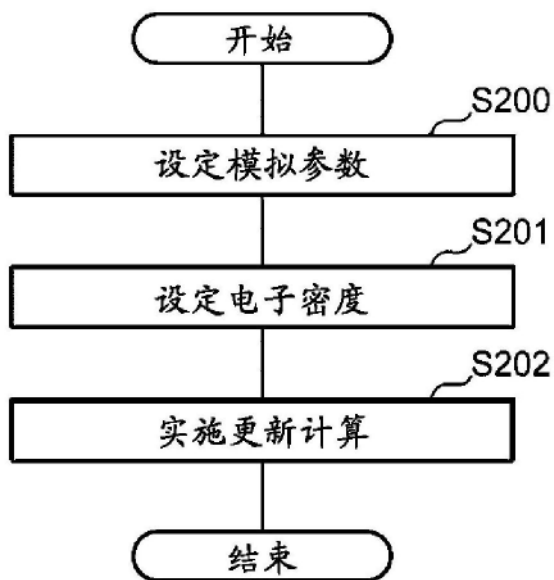


图16

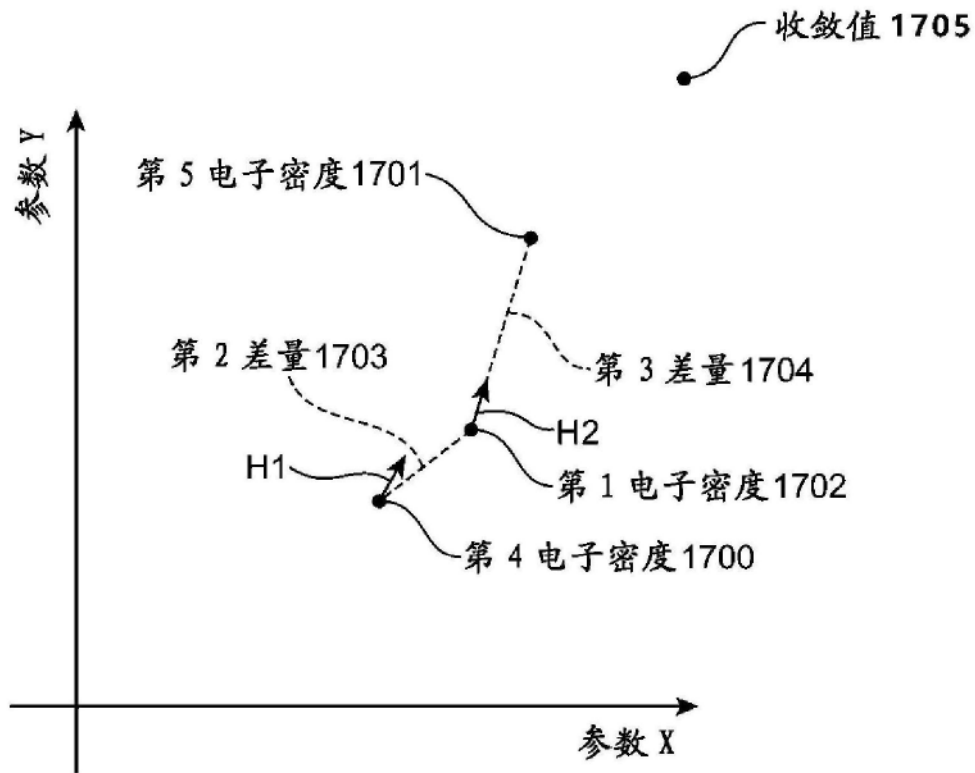


图17

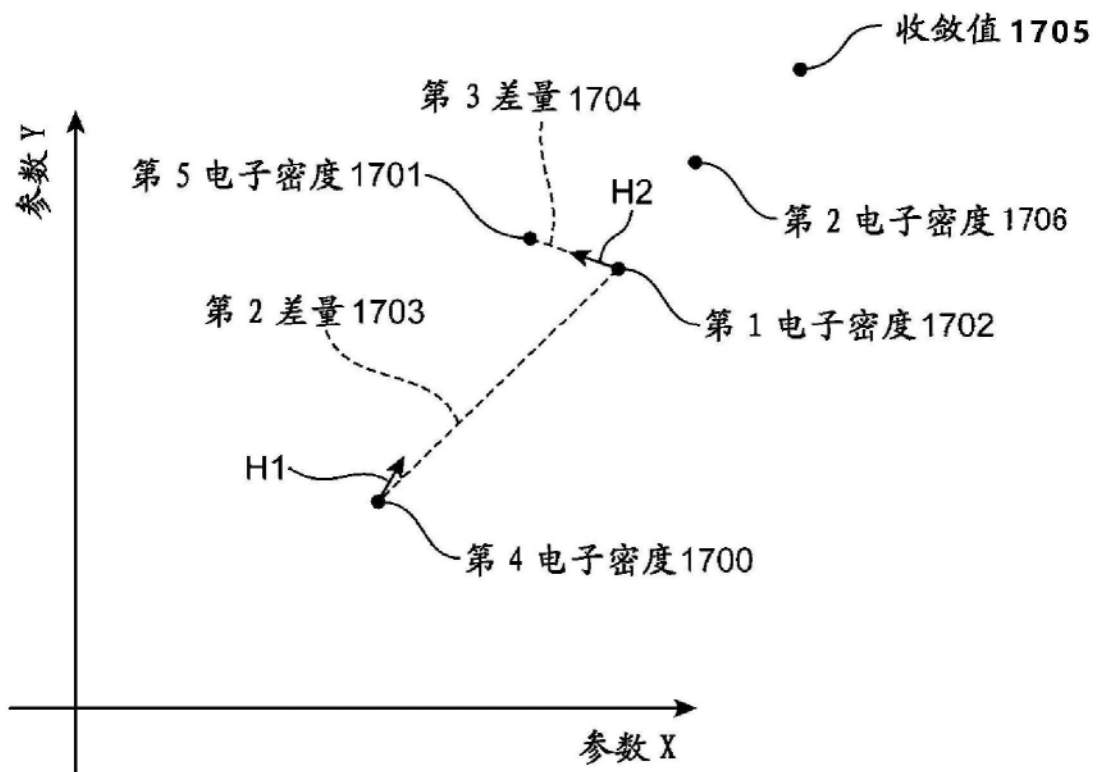


图18

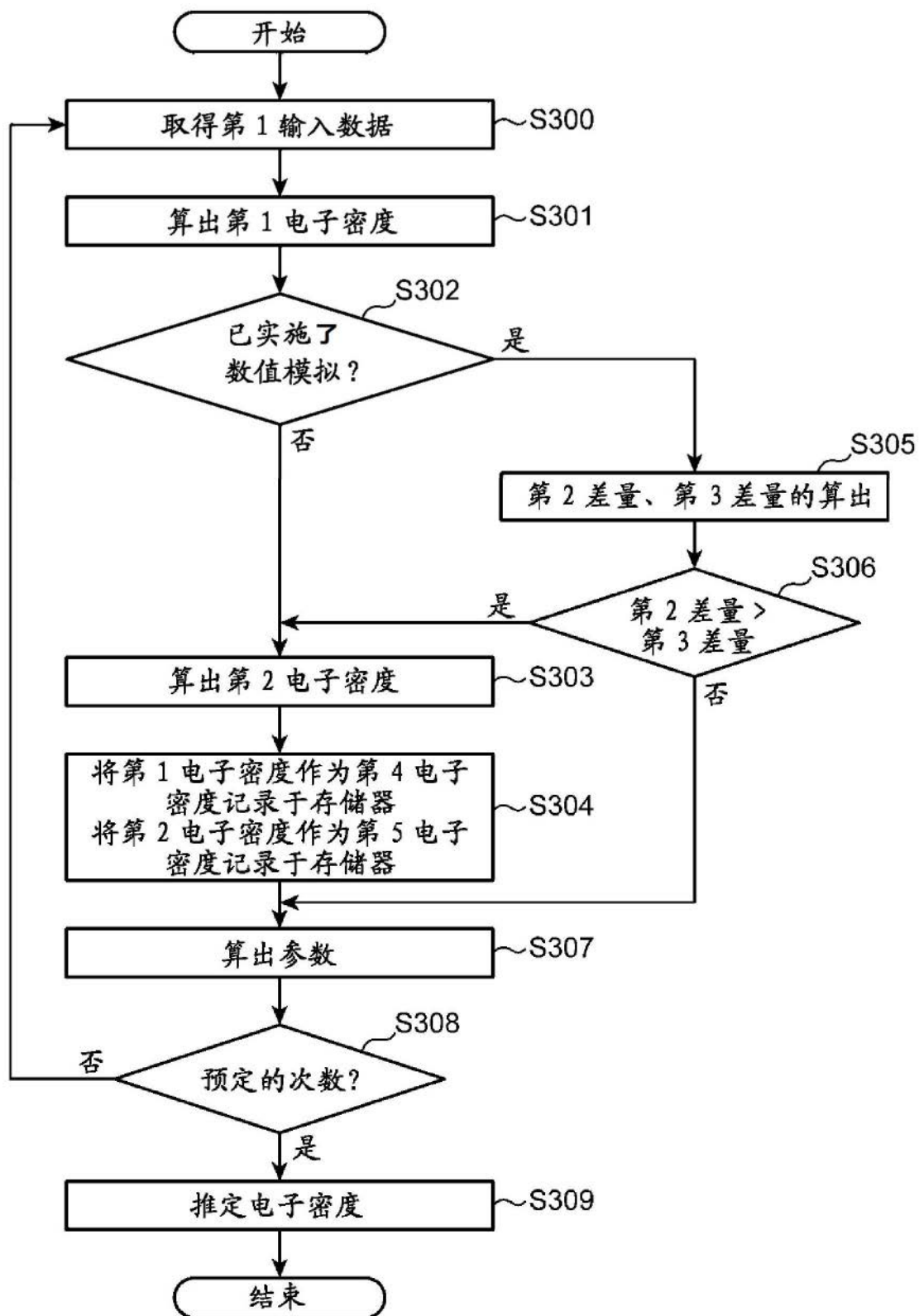


图19

单位晶格向量

	x 成分	y 成分	z 成分
单位晶格向量 a	4.805027	0	0
单位晶格向量 b	-2.40251	4.161275	0
单位晶格向量 c	0	0	13.11625

原子坐标以及元素的物性值

	相对 x 坐标	相对 y 坐标	相对 z 坐标	原子序数	原子半径	...
原子1	0	0	0.352096	8	146.2014	...
原子2	0	0	0.647904	8	146.2014	...
原子3	0.333333	0.666667	0.814571	8	146.2014	...
(中略)			(中略)			...
原子28	0.972813	0.639479	0.583333	13	143	...
原子29	0.972813	0.333333	0.083333	13	143	...
原子30	0.360521	0.333333	0.583333	13	143	...

图20

单位晶格向量

	x 成分	y 成分	z 成分
单位晶格向量 a	4.0679998398	0	0
单位晶格向量 b	0	4.0679998398	0
单位晶格向量 c	0	0	4.0679998398

原子坐标以及铝原子的物性值

	相对 x 坐标	相对 y 坐标	相对 z 坐标	原子序数	原子半径	...
原子1	0	0	0	8	146.2014	...
原子2	0	0.5	0.5	8	146.2014	...
原子3	0.5	0.0	0.5	8	146.2014	...
原子4	0.5	0.5	0.0	8	146.2014	...

作为电子分布成以原子坐标为中心的
正态函数状而算出的描述符

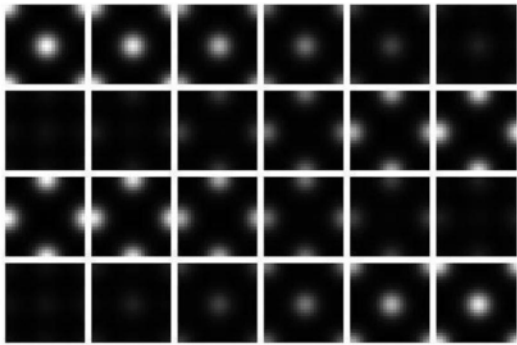


图21