

(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8月15日(15.08.2024)



(10) 国際公開番号
WO 2024/166759 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 10/00 (2019.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/003003

(22) 国際出願日: 2024年1月31日(31.01.2024)

(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 2023-016229 2023年2月6日(06.02.2023) JP

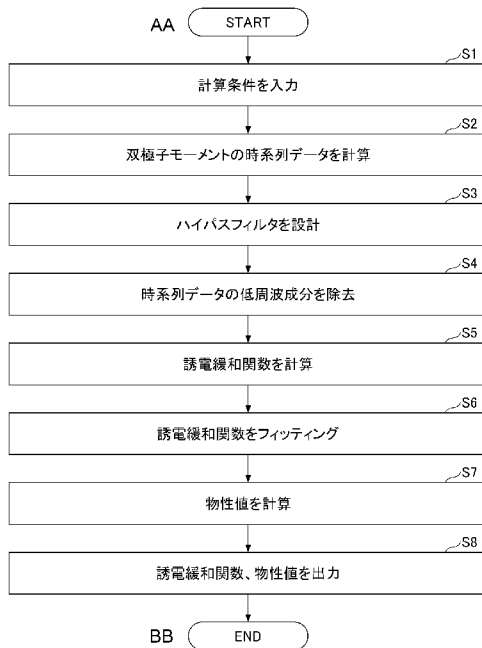
(71) 出願人: ダイキン工業株式会社 (DAIKIN INDUSTRIES, LTD.) [JP/JP]; 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス Osaka (JP). 国立大学法人 東京大学 (THE UNIVERSITY OF TOKYO) [JP/JP]; 〒1138654 東京都文京区本郷七丁目3番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 吉崎 達 (YOSHIZAKI, Satoru); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 水谷 晟吾 (MIZUTANI, Seigo); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 米田 聡 (YONEDA, Satoru); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 東 昌弘 (HIGASHI, Masahiro); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 岸川 洋介 (KISHIKAWA, Yosuke); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一丁目13番1号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 匂坂 重仁 (SAGISAKA, Shigehito); 〒5300001 大阪府大阪市北区梅田一

(54) Title: SIMULATION DEVICE, SIMULATION METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: シミュレーション装置、シミュレーション方法及びプログラム

[図7]



S1 Input calculation condition
S2 Calculate time series data for dipole moment
S3 Design high-pass filter
S4 Remove low-frequency component of time series data
S5 Calculate dielectric relaxation function
S6 Fit dielectric relaxation function
S7 Calculate physical value
S8 Output dielectric relaxation function and physical value
AA START
BB END

(57) Abstract: This simulation device calculates time series data for the dipole moment of a target substance and outputs a dielectric relaxation function based on the time series data in a prescribed frequency band.

(57) 要約: シミュレーション装置が、対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算し、所定の周波数帯の時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する。

[続葉有]



丁目 1 3 番 1 号 大阪梅田ツインタワーズ・サウス ダイキン工業株式会社内 Osaka (JP). 吉本 勇太(**YOSHIMOTO, Yuta**); 〒1138654 東京都文京区本郷七丁目 3 番 1 号 国立大学法人東京大学内 Tokyo (JP). 塩見 淳一郎(**SHIOMI, Junichiro**); 〒1138654 東京都文京区本郷七丁目 3 番 1 号 国立大学法人東京大学内 Tokyo (JP). 北井 孝紀(**KITAI, Koki**); 〒1138654 東京都文京区本郷七丁目 3 番 1 号 国立大学法人東京大学内 Tokyo (JP). チェビヨムギユ(**CHOI, Beomgyu**); 〒1138654 東京都文京区本郷七丁目 3 番 1 号 国立大学法人東京大学内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 伊東 忠重, 外(**ITOH, Tadashige et al.**); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目 1 番 1 号 丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 16 階 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, 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：

シミュレーション装置、シミュレーション方法及びプログラム

技術分野

[0001] 本開示は、シミュレーション装置、シミュレーション方法及びプログラムに関する。

背景技術

[0002] 様々な材料の研究開発において、例えば量子科学計算又は分子動力学計算等により物質の物性値を計算するシミュレーションが活用されている。例えば、特許文献1には、高分子材料の各種物性を計算機シミュレーションにより予測する材料設計システムが開示されている。非特許文献1には、分子動力学シミュレーションを使用して、添加剤を含むポリエチレン系の双極子モーメントから誘電率と損失を計算する技術が開示されている。非特許文献2には、分子動力学シミュレーションを使用して、ポリエチレン共重合体の総双極子モーメントから誘電損失を計算する技術が開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：国際公開第97／06496号

非特許文献

[0004] 非特許文献1：Joakim P. M. Jambeck, Mikael Unge and Sari Laihonon, "Determining the Dielectric Losses in Polymers by Using Molecular Dynamics Simulations", 2015 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP), pp. 146-149, 2015.

非特許文献2：Mayank Misra and Sanat K. Kumar, "Using Time-Temperature Superposition for Determining Dielectric Loss in Functionalized Polyethylenes", ACS Macro Letters 2017, 6, 200-204.

発明の概要

発明が解決しようとする課題

- [0005] しかしながら、シミュレーションにより導出された誘電緩和関数の精度が低いことがある、という課題がある。誘電緩和関数の精度が低いと、その誘電緩和関数を用いて計算した物性値の精度も低くなる。
- [0006] 本開示は、物質の誘電緩和関数を精度よく導出する。

課題を解決するための手段

- [0007] 本開示の第1の態様に係るシミュレーション装置は、制御部を有するシミュレーション装置であって、前記制御部は、対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算し、所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する。
- [0008] 本開示の第1の態様によれば、物質の誘電緩和関数を精度よく導出することができる。
- [0009] 本開示の第2の態様は、第1の態様に係るシミュレーション装置であって、前記制御部は、ハイパスフィルタを用いて前記周波数帯の前記時系列データを抽出する。
- [0010] 本開示の第3の態様は、第2の態様に係るシミュレーション装置であって、前記制御部は、前記誘電緩和関数の長さに基づいて前記ハイパスフィルタのカットオフ周波数を決定する。
- [0011] 本開示の第4の態様は、第1の態様に係るシミュレーション装置であって、前記制御部は、分子動力学計算により前記双極子モーメントの時系列データを計算する。
- [0012] 本開示の第5の態様は、第1の態様から第4の態様のいずれかに係るシミュレーション装置であって、前記制御部は、前記誘電緩和関数を周波数分解する。
- [0013] 本開示の第6の態様は、第5の態様に係るシミュレーション装置であって、前記制御部は、周波数ごとの複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率又は抵抗率を出力する。
- [0014] 本開示の第7の態様に係るシミュレーション方法は、シミュレーション装

置が有する制御部が、対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算する手順と、所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する手順と、を実行する。

[0015] 本開示の第8の態様に係るプログラムは、シミュレーション装置が有する制御部に、対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算する手順と、所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する手順と、を実行させる。

図面の簡単な説明

[0016] [図1]図1は、従来技術による誘電緩和関数の第1の例を示す図である。

[図2]図2は、従来技術による誘電緩和関数の第2の例を示す図である。

[図3]図3は、従来技術による誘電緩和関数の第3の例を示す図である。

[図4]図4は、従来技術による誘電緩和関数の第4の例を示す図である。

[図5]図5は、フィルタ前の双極子モーメントの一例を示す図である。

[図6]図6は、シミュレーション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。

[図7]図7は、シミュレーション方法の処理手順の一例を示すフローチャートである。

[図8]図8は、フィルタ後の双極子モーメントの一例を示す図である。

[図9]図9は、実施形態による誘電緩和関数の第1の例を示す図である。

[図10]図10は、実施形態による誘電緩和関数の第2の例を示す図である。

[図11]図11は、実施形態による複素誘電率の一例を示す図である。

[図12]図12は、実施形態による誘電正接の一例を示す図である。

発明を実施するための形態

[0017] 以下、各実施形態について添付の図面を参照しながら説明する。なお、本明細書及び図面において、実質的に同一の機能構成を有する構成要素については、同一の符号を付することにより重複した説明を省略する。

[0018] [実施形態]

本開示の一実施形態は、分子動力学計算等によりポリマーの物性値を計算

するシミュレーション装置である。本実施形態におけるシミュレーション装置は、計算対象とするポリマー（以下、「対象物質」とも呼ぶ）の誘電緩和関数を導出し、その誘電緩和関数に基づいて対象物質の物性値を計算する。誘電緩和関数に基づいて計算可能な物性値は、例えば、周波数依存の複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率及び抵抗率等の電気特性が挙げられる。

[0019] 従来技術では、以下のように対象物質の物性値を計算する。ここでは、物性値として周波数依存の複素誘電率を計算する例を説明する。

[0020] 第1に、分子動力学計算により双極子モーメントの時系列データ $M(t)$ を求める。ただし、 t は時間を表す。

[0021] 第2に、双極子モーメントの時系列データ $M(t)$ から誘電緩和関数 $\Phi(t)$ を計算する。誘電緩和関数 $\Phi(t)$ は、式(1)により計算することができる。

[0022] [数1]

$$\Phi(t) = \frac{\langle M(t) \cdot M(0) \rangle - \langle M \rangle^2}{\langle M(0)^2 \rangle - \langle M \rangle^2} \quad \dots(1)$$

[0023] 第3に、誘電緩和関数 $\Phi(t)$ を式(2)でフィッティングする。

[0024] [数2]

$$\Phi_{fit}(t) = A \exp \left[- \left(\frac{t}{10^{\alpha_1}} \right)^{\beta_1} \right] + (1 - A) \exp \left[- \left(\frac{t}{10^{\alpha_2}} \right)^{\beta_2} \right] \quad \dots(2)$$

[0025] 第4に、フィッティング後の誘電緩和関数 $\Phi_{fit}(t)$ を周波数分解する。周波数分解は式(3)のフーリエ変換により行うことができる。これにより、周波数依存の複素誘電率が得られる。

[0026]

[数3]

$$\frac{\varepsilon^*(i\omega) - \varepsilon_\infty}{\Delta\varepsilon} = \int_0^\infty dt \left[-\frac{d\Phi_{fit}(t)}{dt} \right] \exp(-i\omega t) \quad \cdots(3)$$

[0027] 従来技術では、分子動力学計算により導出される誘電緩和関数の精度が低いことが課題である。例えば、ポリマーの種類によっては、導出された誘電緩和関数の形状が自然法則に反する形状となることがある。また、例えば、同じポリマーであっても計算条件によって誘電緩和関数の形状が異なることがある。

[0028] 従来技術で導出される誘電緩和関数について、図1乃至図4を参照しながら説明する。図1乃至図4は、従来技術による誘電緩和関数の第1の例乃至第4の例を示す図である。誘電緩和関数の第1の例は、正しく導出された誘電緩和関数の一例である。誘電緩和関数の第2の例乃至第4の例は、正しく導出されなかった誘電緩和関数の一例である。

[0029] 本来、誘電緩和関数は、1から0へ減衰する形状となる。図1に示した誘電緩和関数は、時間経過に伴い概ね逡減し0に収束する形状となっている。したがって、図1に示した誘電緩和関数は正しく導出されている。

[0030] 一方、図2乃至図4に示した誘電緩和関数は、0近辺に減衰した後に上昇に転じたり（図2参照）、1以上の値から0以下の値へ急落したり（図3参照）、0以下の値まで減衰した後に上昇したり（図4）する形状となっている。したがって、図2乃至図4に示した誘電緩和関数は正しく導出できていない。

[0031] 図5は、分子動力学計算により計算した双極子モーメントの時系列データを示す図であり、時間の刻み幅を1フェムト秒で、500ナノ秒の時間長の平衡化計算を実施した結果である。図5には、シミュレーション空間におけるx軸方向、y軸方向及びz軸方向それぞれの双極子モーメントの時間変化を示している。図5では、各軸方向の双極子モーメントが重なり合って示さ

れている。x軸方向及びy軸方向の双極子モーメントは、実際には、z軸方向の双極子モーメントと同様に、0近辺を中心とした範囲に分布している。以降では、一例として、z軸方向の双極子モーメントについて説明するが、x軸方向及びy軸方向についても同様である。

[0032] 式(1)では、双極子モーメントの平均値が任意の時間領域において一定であることを前提としている。しかしながら、図5に示した双極子モーメントの時系列データは、一点鎖線の矢印で示すように、時間軸に対して緩やかな減少傾向を示している。したがって、分子動力学計算により導出した双極子モーメントの時系列データは、式(1)の前提を満たしていない。

[0033] ポリマーにおいては、様々な緩和モードが存在する。図5に示した双極子モーメントは、2MHzから1THzの周波数範囲を対象として計算したものである。図5に示した双極子モーメントの緩やかな揺らぎは、2MHz未満の緩和による影響であることが明らかである。

[0034] 双極子モーメントの計算系は、実材料と比較すると小規模であり、局所的な影響を受けやすい。そのため、構造緩和と共に双極子モーメントがシフトしており、その影響が低周波領域に現れていると考えられる。したがって、双極子モーメントの時系列データから低周波成分を除去すれば、図5に示されているような緩やかな揺らぎを抑制することができる。

[0035] 本実施形態は、対象物質の誘電緩和関数を精度よく導出することを目的とする。精度の良い誘電緩和関数を導出することができれば、その誘電緩和関数を用いて計算した物性値の精度も向上する。

[0036] <ハードウェア構成>

図6は、本実施形態におけるシミュレーション装置10のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。図6に示されているように、シミュレーション装置10は、プロセッサ101、メモリ102、補助記憶装置103、操作装置104、表示装置105、通信装置106、ドライブ装置107を有する。シミュレーション装置10の各ハードウェアは、バス108を介して相互に接続されている。

- [0037] プロセッサ１０１は、ＣＰＵ（Central Processing Unit）等の各種演算デバイスを有する。プロセッサ１０１は、補助記憶装置１０３にインストールされている各種プログラムをメモリ１０２上に読み出して実行する。
- [0038] メモリ１０２は、ＲＯＭ（Read Only Memory）、ＲＡＭ（Random Access Memory）等の主記憶デバイスを有する。プロセッサ１０１とメモリ１０２とは、いわゆるコンピュータ（以下、「制御部」ともいう）を形成し、プロセッサ１０１が、メモリ１０２上に読み出した各種プログラムを実行することで、当該コンピュータは各種機能を実現する。
- [0039] 補助記憶装置１０３（以下、「記憶部」ともいう）は、各種プログラムや、各種プログラムがプロセッサ１０１によって実行される際に用いられる各種データを格納する。
- [0040] 操作装置１０４は、シミュレーション装置１０のユーザが各種操作を行うための操作デバイスである。表示装置１０５は、シミュレーション装置１０により実行される各種処理の処理結果を表示する表示デバイスである。
- [0041] 通信装置１０６は、不図示のネットワークを介して外部装置と通信を行うための通信デバイスである。
- [0042] ドライブ装置１０７は、記憶媒体１０９をセットするためのデバイスである。ここでいう記憶媒体１０９には、ＣＤ－ＲＯＭ、フレキシブルディスク、光磁気ディスク等のように情報を光学的、電氣的あるいは磁氣的に記憶する媒体が含まれる。また、記憶媒体１０９には、ＲＯＭ、フラッシュメモリ等のように情報を電氣的に記憶する半導体メモリ等が含まれていてもよい。
- [0043] なお、補助記憶装置１０３にインストールされる各種プログラムは、例えば、配布された記憶媒体１０９がドライブ装置１０７にセットされ、記憶媒体１０９に記憶された各種プログラムがドライブ装置１０７により読み出されることでインストールされる。あるいは、補助記憶装置１０３にインストールされる各種プログラムは、通信装置１０６を介してネットワークからダウンロードされることで、インストールされてもよい。
- [0044] <シミュレーション方法の流れ>

図 7 は、本実施形態におけるシミュレーション装置 10 が実行するシミュレーション方法の流れの一例を示すフローチャートである。

- [0045] ステップ S 1 において、シミュレーション装置 10 の制御部は、計算条件の入力を受け付ける。本実施形態における計算条件は、対象物質を識別する識別情報及び誘電緩和関数の長さを示す情報が含まれる。
- [0046] 識別情報は、物質を識別可能な情報であればどのようなものでもよい。物質を識別可能な情報の一例は、化合物名、構造式、SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) 情報等である。
- [0047] 誘電緩和関数の長さは、誘電緩和関数の時間軸の長さである。本実施形態における誘電緩和関数の長さは、100 ナノ秒とする。
- [0048] ステップ S 2 において、シミュレーション装置 10 の制御部は、分子動力学計算により、所定の時間間隔で対象物質の双極子モーメントを計算する。これにより、双極子モーメントの時系列データが生成される。
- [0049] 双極子モーメントを計算する時間長は、誘電緩和関数を導出するために十分な時間長であればよい。本実施形態では、双極子モーメントを計算する時間長は、500 ナノ秒とする。
- [0050] ステップ S 3 において、シミュレーション装置 10 の制御部は、ステップ S 1 で受け付けた計算条件に基づいて、ハイパスフィルタを設計する。ハイパスフィルタのカットオフ周波数は、誘電緩和関数の長さの逆数とする。本実施形態では、誘電緩和関数の長さを 100 ナノ秒としたため、カットオフ周波数は 10 MHz となる。
- [0051] ステップ S 4 において、シミュレーション装置 10 の制御部は、ステップ S 3 で設計したハイパスフィルタを用いて、双極子モーメントの時系列データから低周波成分を除去する。言い替えると、シミュレーション装置 10 の制御部は、双極子モーメントの時系列データからカットオフ周波数以上の周波数帯を抽出する。これにより、フィルタ後の双極子モーメントの時系列データが生成される。本実施形態では、フィルタ後の双極子モーメントの時系列データは、10 MHz 未満の成分が除去されている。

- [0052] 図8は、フィルタ後の双極子モーメントの時系列データを示す図である。図8に示した双極子モーメントの時系列データは、一点鎖線の矢印で示すように、0を中心に概ね均等となっていることがわかる。したがって、フィルタ後の双極子モーメントの時系列データでは、図5に示したフィルタ前の双極子モーメントの時系列データに現れていた緩やかなゆらぎが抑制されている。なお、図8には、z軸方向の双極子モーメントの時間変化のみを示したが、x軸方向及びy軸方向の双極子モーメントにおいても同様となる。
- [0053] 図7に戻って説明する。ステップS5において、シミュレーション装置10の制御部は、フィルタ後の双極子モーメントの時系列データを $M(t)$ とし、式(1)により誘電緩和関数 $\Phi(t)$ を計算する。
- [0054] ステップS6において、シミュレーション装置10の制御部は、ステップS5で計算した誘電緩和関数 $\Phi(t)$ を式(2)でフィッティングする。
- [0055] 本実施形態で導出される誘電緩和関数について、図9及び図10を参照しながら説明する。図9及び図10は、本実施形態による誘電緩和関数の第1の例及び第2の例を示す図である。
- [0056] 図9には、図2に示した従来技術による誘電緩和関数(破線)と、同じ双極子モーメントの時系列データから導出された本実施形態による誘電緩和関数(実線)とが示されている。図10には、図3に示した従来技術による誘電緩和関数(破線)と、同じ双極子モーメントの時系列データから導出された本実施形態による誘電緩和関数(実線)とが示されている。
- [0057] 図9及び図10に示されているように、本実施形態による誘電緩和関数は、いずれも1から0へ減衰する形状となっている。したがって、従来技術では誘電緩和関数を正しく導出できなかった双極子モーメントの時系列データであっても、本実施形態によれば誘電緩和関数を正しく導出できていることがわかる。
- [0058] 図7に戻って説明する。ステップS7において、シミュレーション装置10の制御部は、ステップS6でフィッティングした誘電緩和関数 $\Phi_{fit}(t)$ に基づいて、所定の物性値を計算する。例えば、シミュレーション装置10

の制御部は、誘電緩和関数 $\Phi(t)$ をフーリエ変換することで、周波数依存の複素誘電率を計算する。また、例えば、シミュレーション装置 10 の制御部は、誘電緩和関数 $\Phi(t)$ に基づいて、周波数依存の誘電正接、複素電気伝導率又は抵抗率等を求めてもよい。

[0059] 図 11 は、本実施形態による複素誘電率（実部）の一例を示す図である。図 12 は、実施形態による誘電正接の一例を示す図である。図 11 及び図 12 に示されているように、本実施形態によれば、周波数依存の複素誘電率及び誘電正接を正しく計算することができる。

[0060] 図 7 に戻って説明する。ステップ S8 において、シミュレーション装置 10 の制御部は、ステップ S6 で計算した誘電緩和関数を出力する。シミュレーション装置 10 の制御部は、誘電緩和関数と共に又は誘電緩和関数に代えて、ステップ S7 で計算した周波数依存の複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率及び抵抗率の少なくとも 1 つを出力してもよい。

[0061] <まとめ>

以上、本開示の各実施形態によれば、誘電緩和関数を精度よく導出することができる。例えば、分子動力学計算により生成した双極子モーメントの時系列データは、低周波成分に局所的な影響が現れ、全体として緩やかなゆらぎが生じることがある。本実施形態におけるシミュレーション装置は、対象物質の双極子モーメントの時系列データのうち、所定の周波数帯の時系列データに基づいて誘電緩和関数を出力する。したがって、本実施形態におけるシミュレーション装置によれば、誘電緩和関数を精度よく導出することができる。

[0062] 本実施形態におけるシミュレーション装置は、ハイパスフィルタを用いて所定の周波数帯の時系列データを抽出する。また、ハイパスフィルタのカットオフ周波数は、誘電緩和関数の長さに基づいて決定される。したがって、本実施形態におけるシミュレーション装置によれば、局所的な影響が現れる低周波成分を適切に除去することができる。

[0063] 本実施形態におけるシミュレーション装置は、誘電緩和関数に基づいて、

周波数ごとの複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率及び抵抗率の少なくとも1つを出力する。本実施形態におけるシミュレーション装置によれば、誘電緩和関数を精度よく導出することができるため、その誘電緩和関数に基づいて、周波数ごとの複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率及び抵抗率を精度よく計算することができる。

[0064] [補足]

上記で説明した実施形態の各機能は、一又は複数の処理回路によって実現することが可能である。ここで、本明細書における「処理回路」とは、電子回路により実装されるCPU (Central Processing Unit) 又はGPU (Graphics Processing Unit) のようにソフトウェアによって各機能を実行するようプログラミングされたプロセッサや、上記で説明した各機能を実行するよう設計されたASIC (Application Specific Integrated Circuit)、DSP (Digital Signal Processor)、FPGA (Field Programmable Gate Array) や従来の回路モジュール等の機器を含むものとする。

[0065] 以上、実施形態を説明したが、特許請求の範囲の趣旨及び範囲から逸脱することなく、形態や詳細の多様な変更が可能なが理解されるであろう。

[0066] 本願は、日本国特許庁に2023年2月6日出願された日本国特許出願2023-16229号の優先権を主張するものであり、その全内容を参照することにより本願に援用する。

符号の説明

[0067] 10 シミュレーション装置

101 プロセッサ

102 メモリ

103 補助記憶装置

104 操作装置

105 表示装置

106 通信装置

107 ドライブ装置

108 バス

請求の範囲

- [請求項1] 制御部を有するシミュレーション装置であって、
前記制御部は、
対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算し、
所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する、
シミュレーション装置。
- [請求項2] 前記制御部は、
ハイパスフィルタを用いて前記周波数帯の前記時系列データを抽出する、
請求項1に記載のシミュレーション装置。
- [請求項3] 前記制御部は、
前記誘電緩和関数の長さに基づいて前記ハイパスフィルタのカットオフ周波数を決定する、
請求項2に記載のシミュレーション装置。
- [請求項4] 前記制御部は、
分子動力学計算により前記時系列データを計算する、
請求項1に記載のシミュレーション装置。
- [請求項5] 前記制御部は、
前記誘電緩和関数を周波数分解する、
請求項1から4のいずれかに記載のシミュレーション装置。
- [請求項6] 前記制御部は、
周波数ごとの複素誘電率、誘電正接、複素電気伝導率又は抵抗率を出力する、
請求項5に記載のシミュレーション装置。
- [請求項7] シミュレーション装置が有する制御部が、
対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算する手順と、
所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する

る手順と、

を実行するシミュレーション方法。

[請求項8]

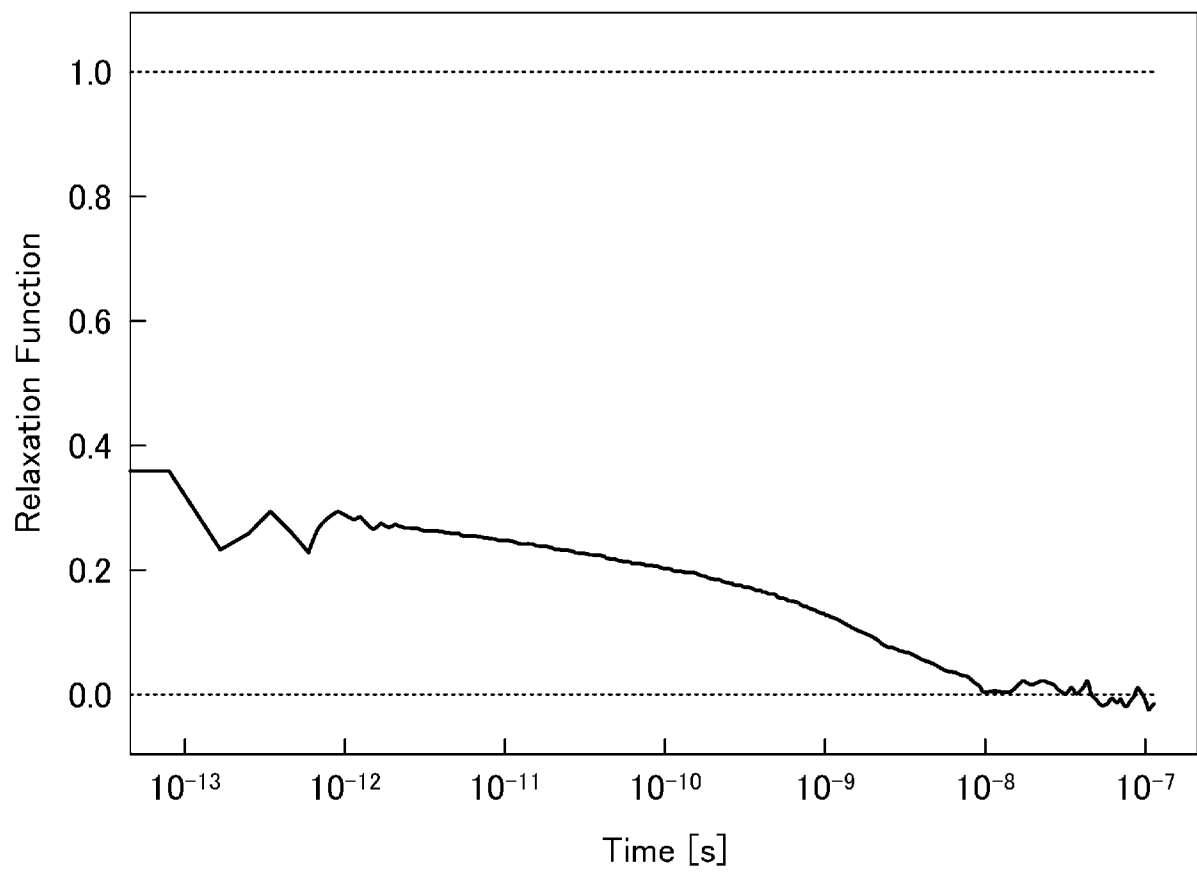
シミュレーション装置が有する制御部に、

対象物質の双極子モーメントの時系列データを計算する手順と、

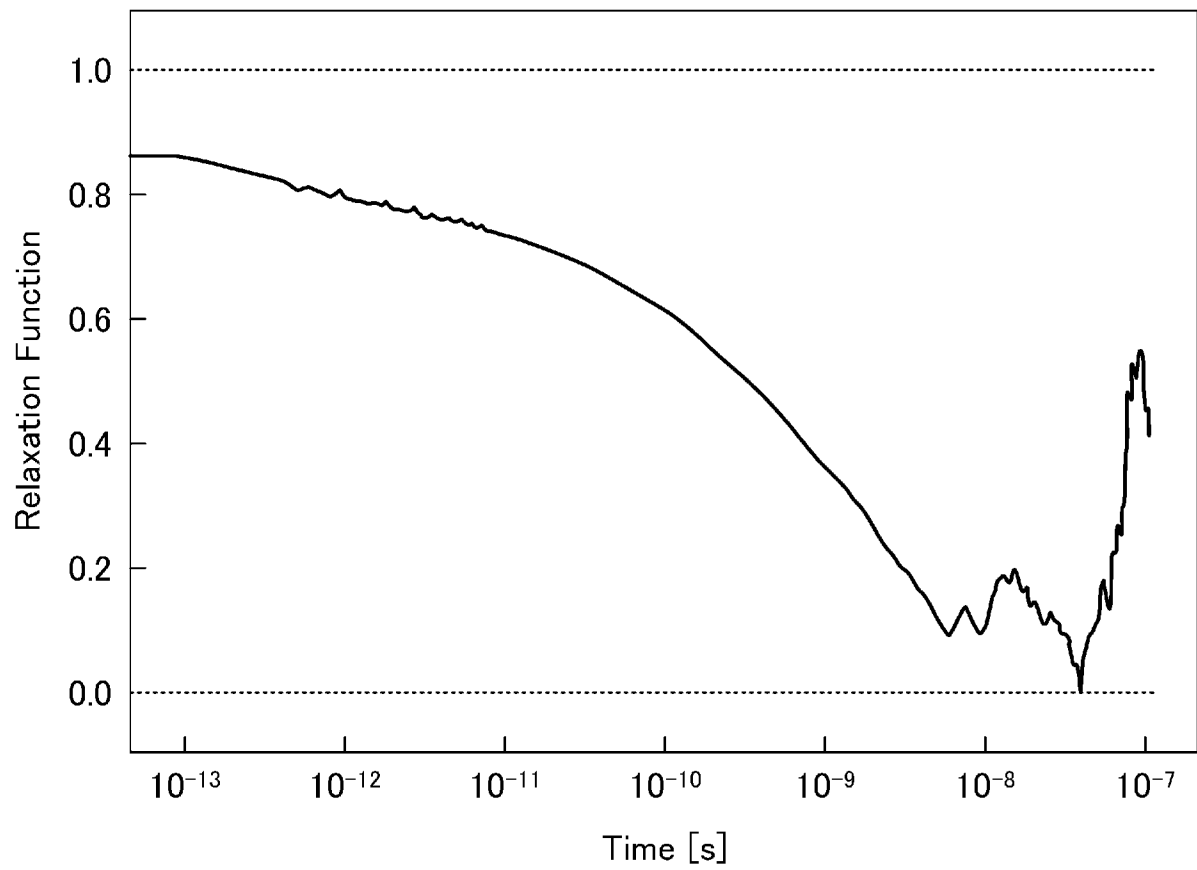
所定の周波数帯の前記時系列データに基づく誘電緩和関数を出力する手順と、

を実行させるためのプログラム。

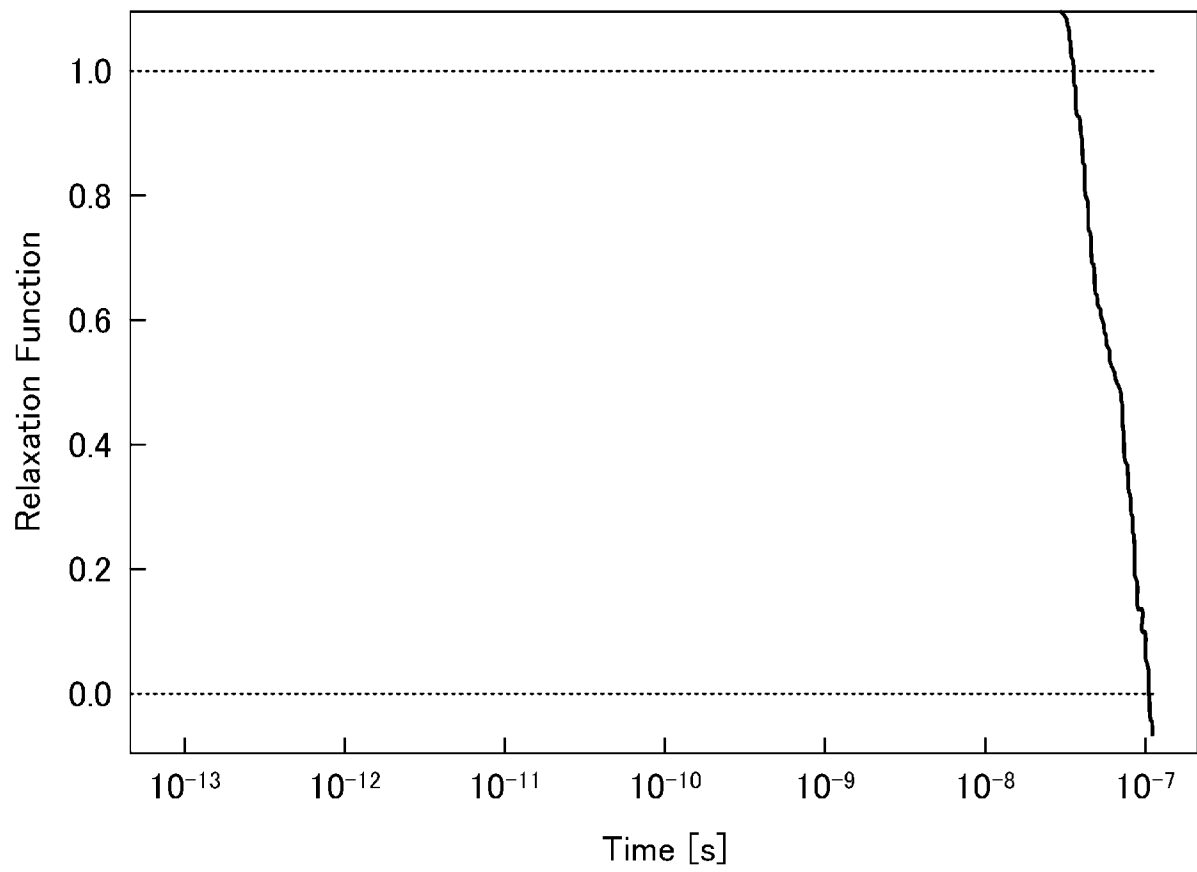
[図1]



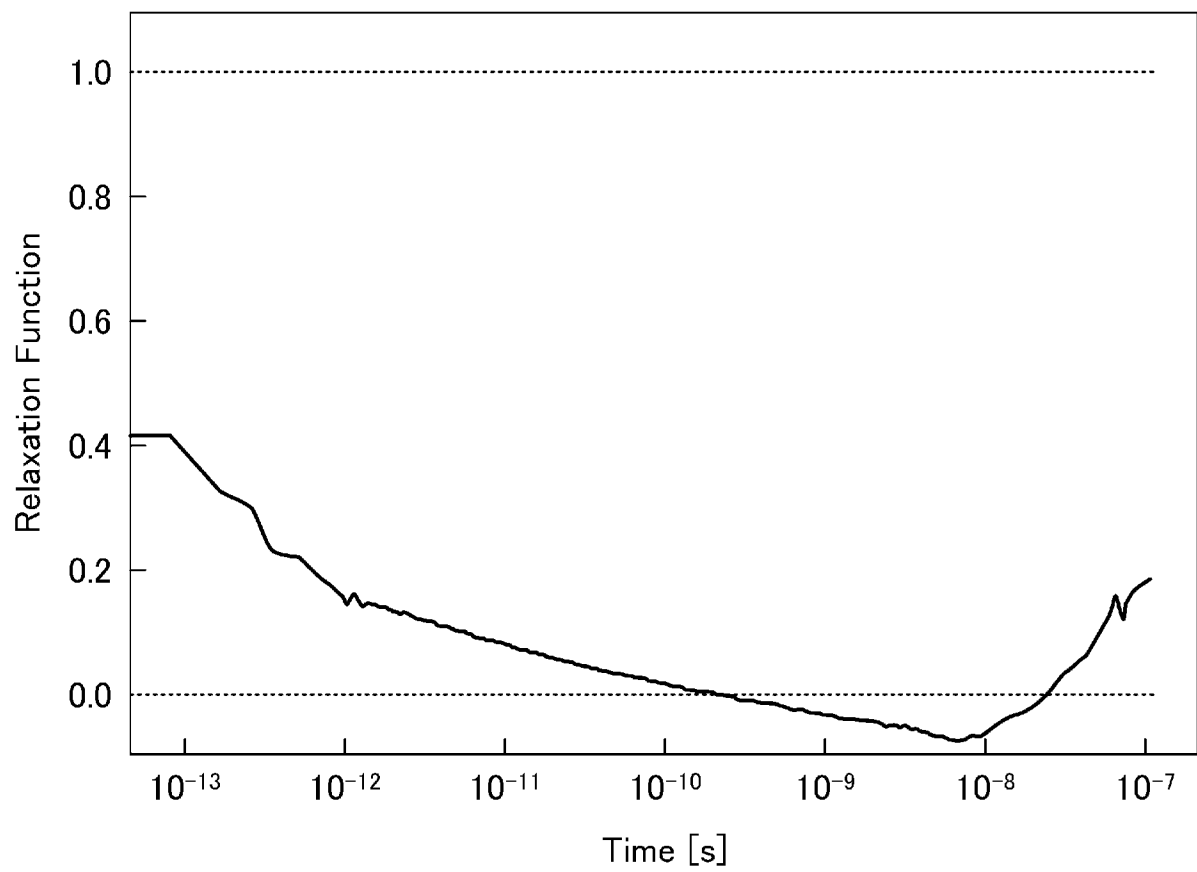
[図2]



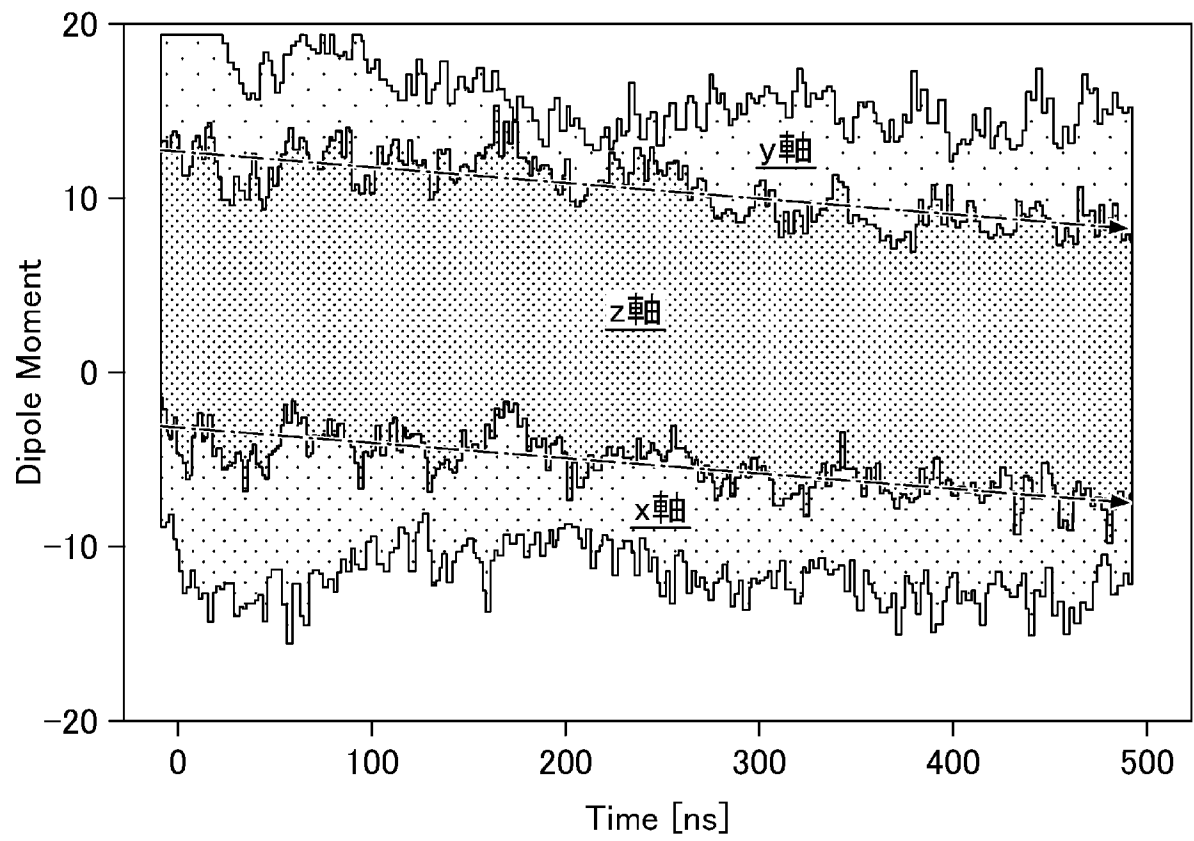
[図3]



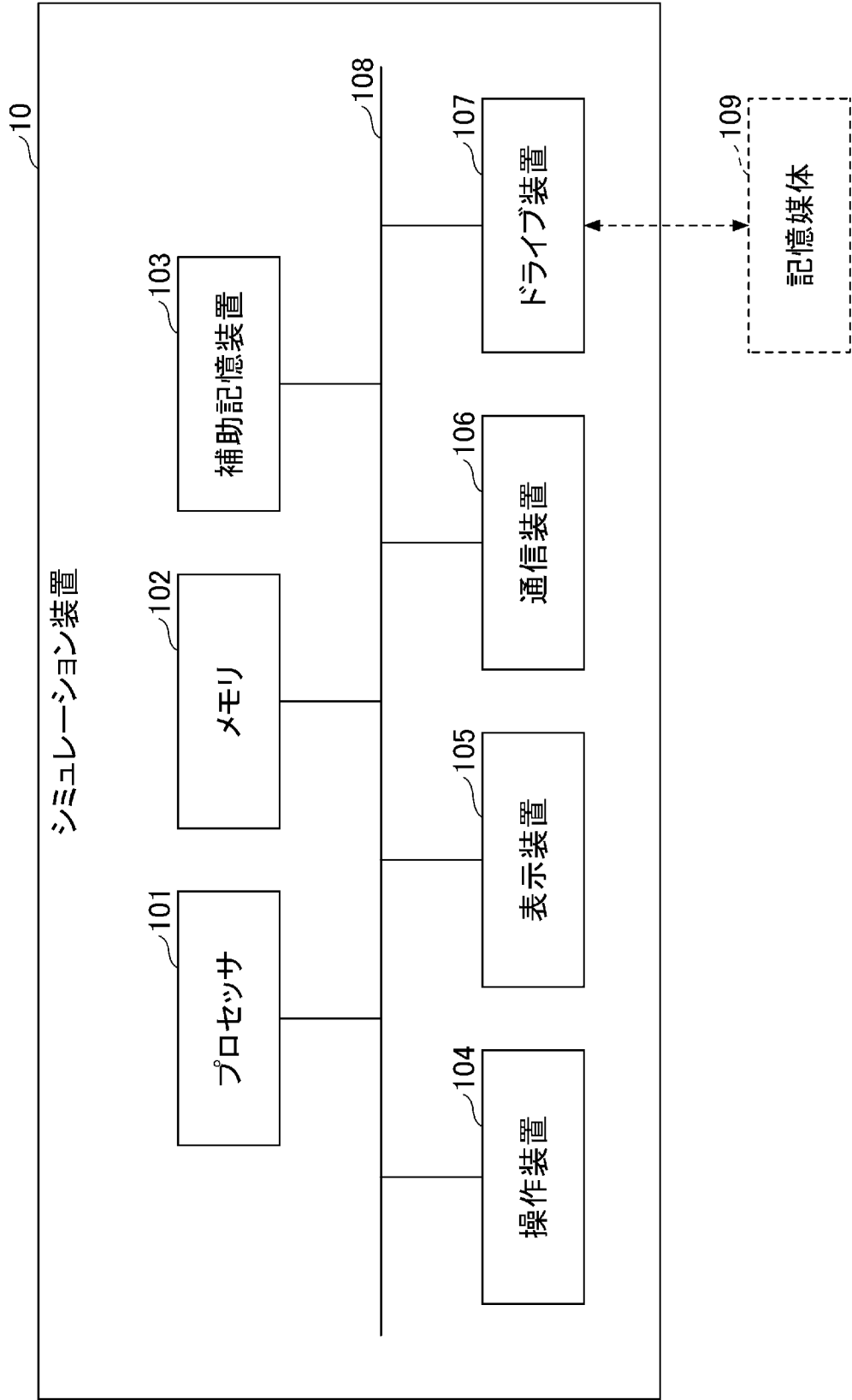
[図4]



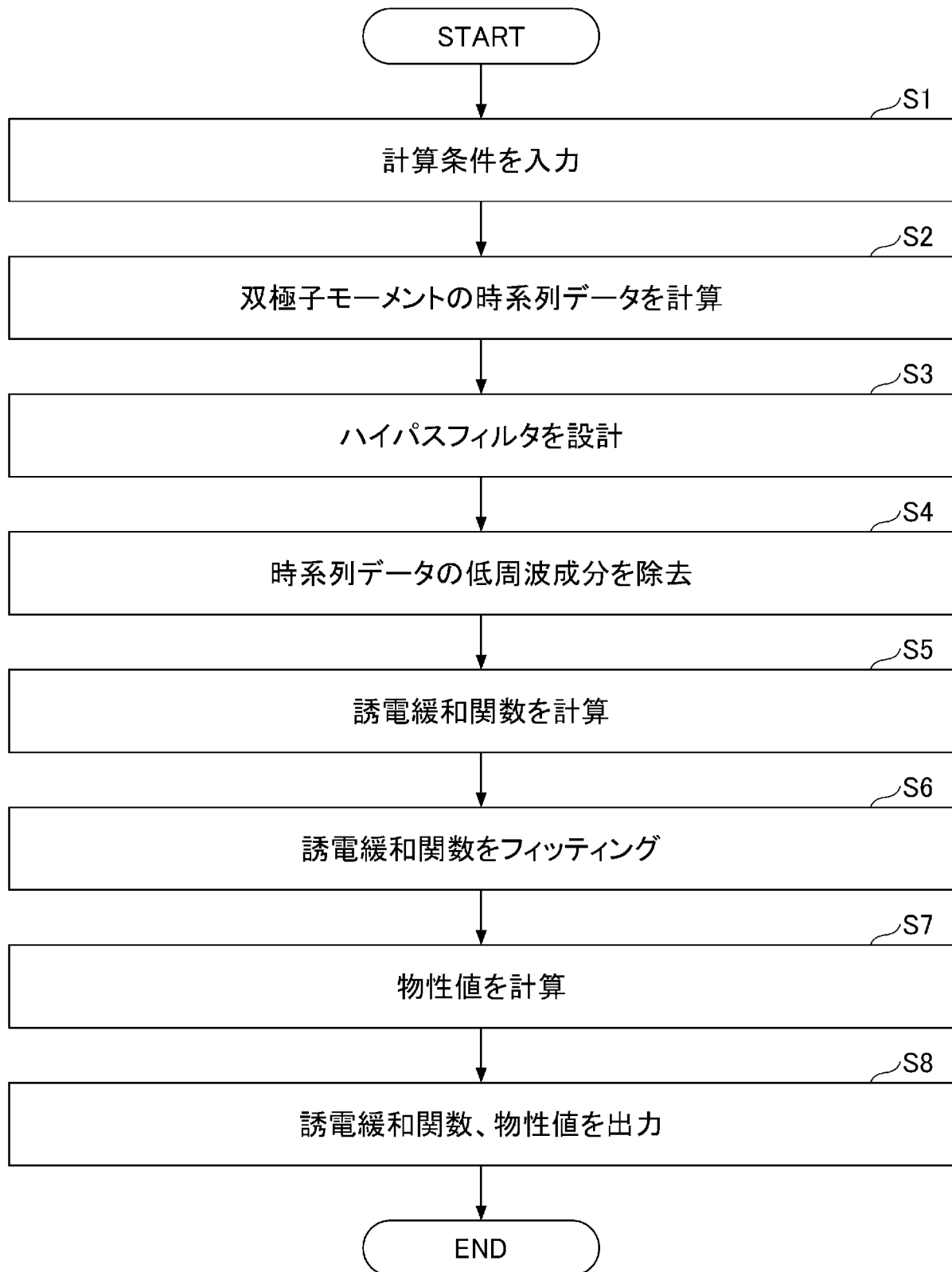
[図5]



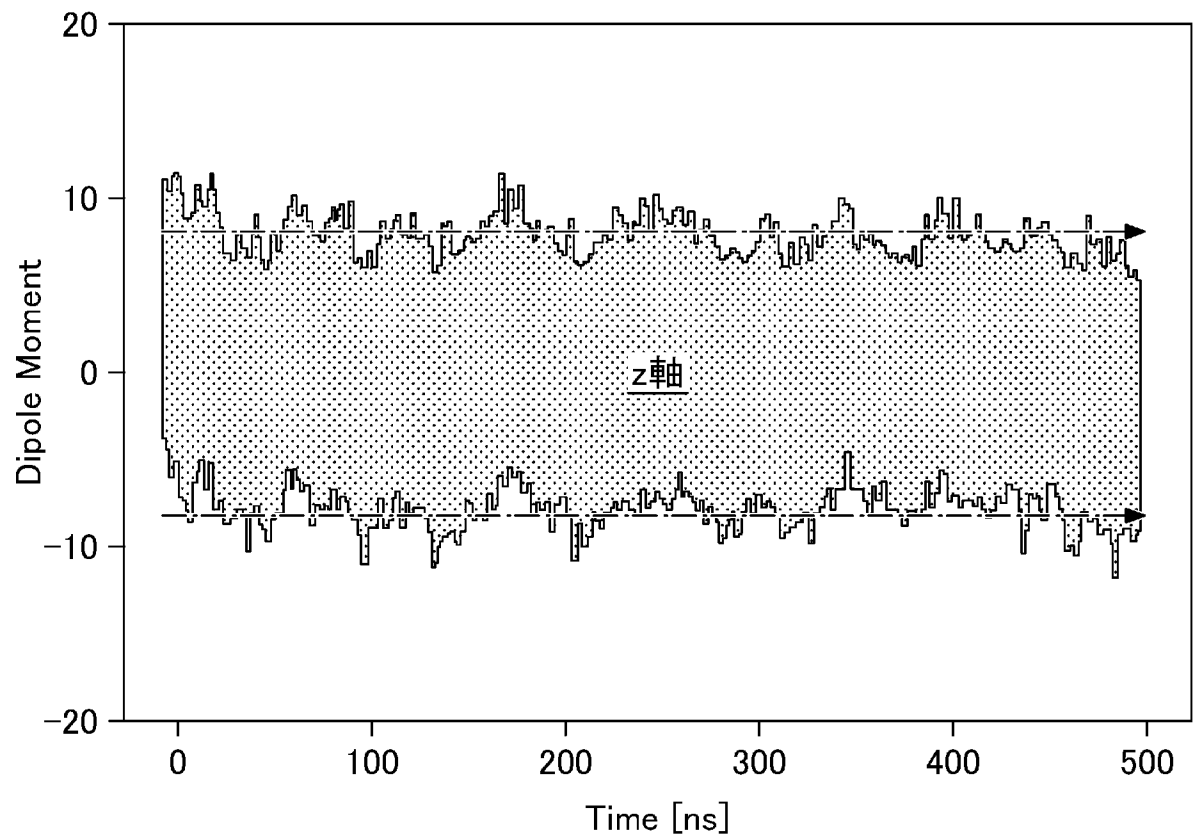
[図6]



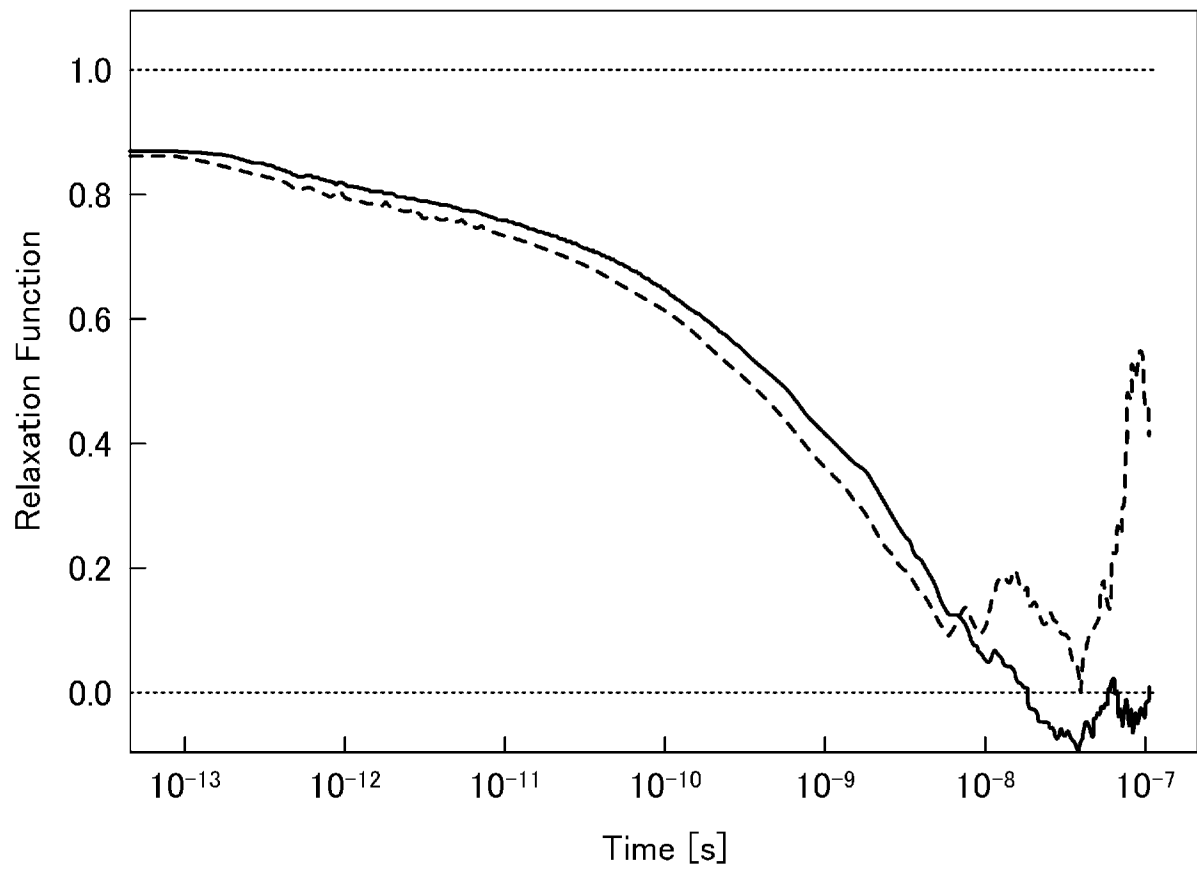
[図7]



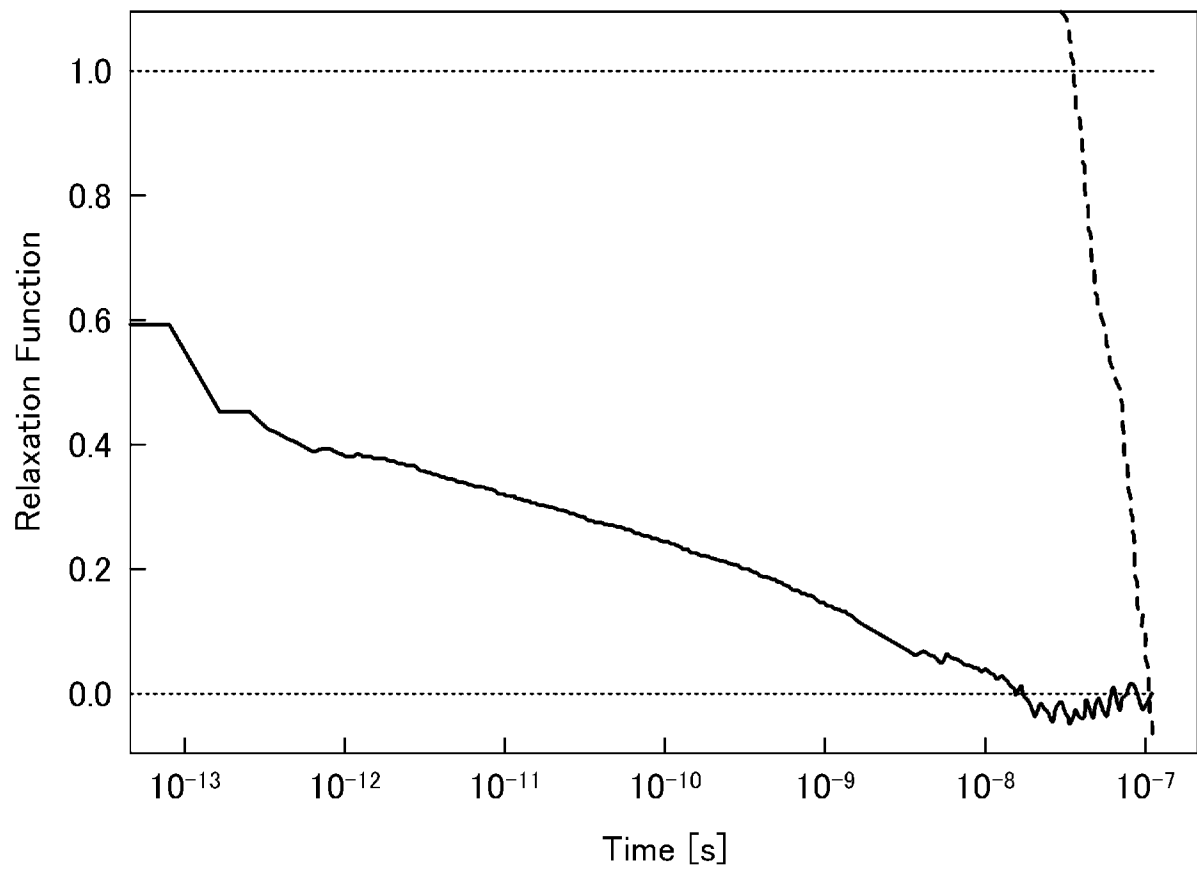
[図8]



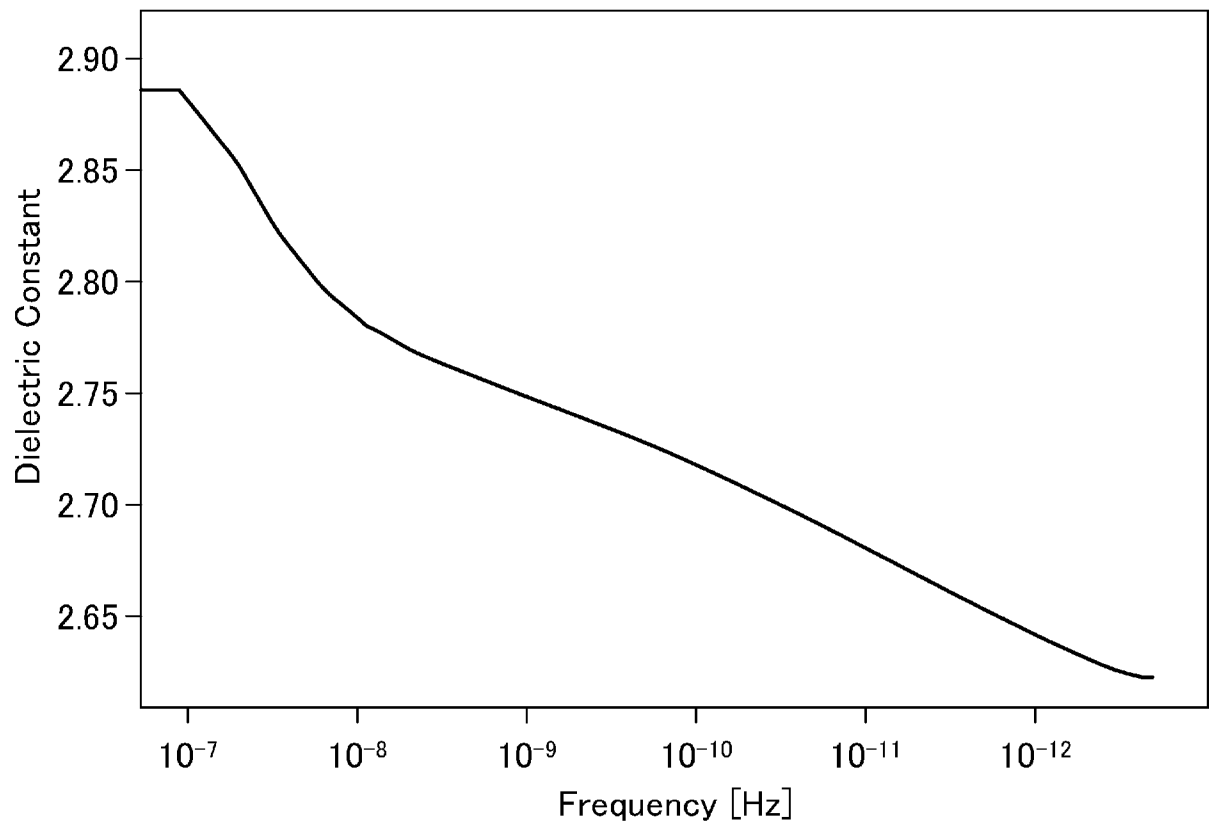
[図9]



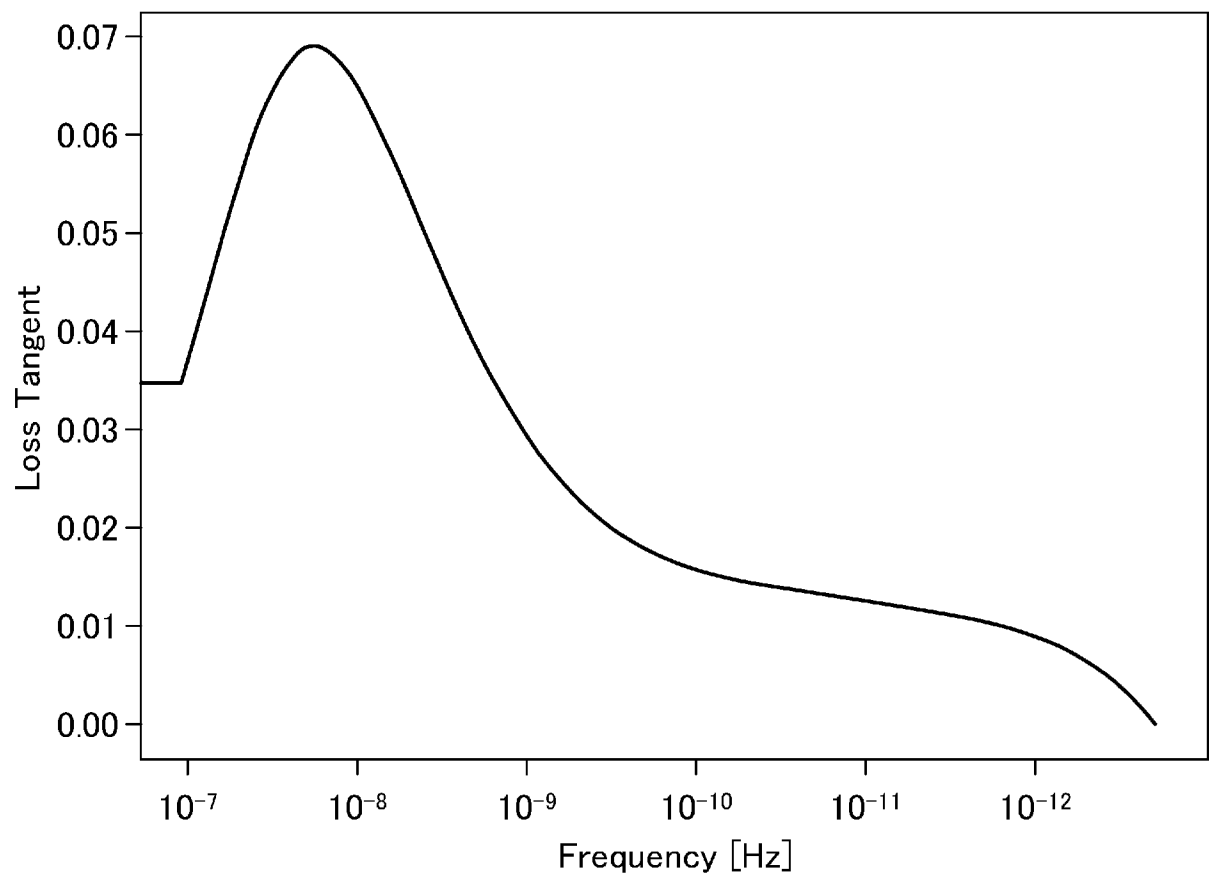
[図10]



[図11]



[図12]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/003003

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER G16C 10/00 (2019.01)i FI: G16C10/00 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) G16C10/00-99/00 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 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024 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.
A	HOU, Wei et al. Static dielectric constant and dielectric loss of cellulose insulation: Molecular dynamics simulations. High Voltage [online]. 22 March 2021, vol. 6, issue 6, pp. 1051-1060, [retrieval on 01 March 2024], Retrieved from the Internet: <URL:https://doi.org/10.1049/hve2.12087> entire text, all drawings	1-8
A	MISRA, Mayank et al. Using Time-Temperature Superposition for Determining Dielectric Loss in Functionalized Polyethylenes. ACS Macro Letters [online]. 14 February 2017, vol. 6, no. 3, pp. 200-204, [retrieval on 01 March 2024], Retrieved from the Internet: <URL:https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.6b00978> entire text, all drawings	1-8
A	CN 114970322 A (SHANDONG UNIVERSITY) 30 August 2022 (2022-08-30) entire text, all drawings	1-8
☐ 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 “D” document cited by the applicant in the international application “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 01 March 2024		Date of mailing of the international search report 12 March 2024
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.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2024/003003

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
CN	114970322	A	30 August 2022	(Family: none)	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC））

G16C 10/00(2019.01)i

FI: G16C10/00

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））

G16C10/00-99/00

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

1971-2024年

日本国実用新案登録公報

1996-2024年

日本国登録実用新案公報

1994-2024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
A	HOU, Wei et al., Static dielectric constant and dielectric loss of cellulose insulation: Molecular dynamics simulations, High Voltage [online], 2021.03.22, Vol.6, Issue 6, Pages 1051-1060, [検索日:2024年3月1日], Retrieved from the Internet: <URL:https://doi.org/10.1049/hve2.12087> 全文、全図	1-8
A	MISRA, Mayank et al., Using Time-Temperature Superposition for Determining Dielectric Loss in Functionalized Polyethylenes, ACS Macro Letters [online], 2017.02.14, Vol.6, No.3, Pages 200-204, [検索日:2024年3月1日], Retrieved from the Internet: <URL:https://doi.org/10.1021/acsmacrolett.6b00978> 全文、全図	1-8
A	CN 114970322 A (SHANDONG UNIVERSITY) 30.08.2022 (2022 - 08 - 30) 全文、全図	1-8

☐ 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、一般的技术水準を示すもの

“D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献

“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

01.03.2024

国際調査報告の発送日

12.03.2024

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）

岡北 有平 5R 4677

電話番号 03-3581-1101 内線 3502

様式 PCT/ISA/210（第2ページ）（2022年7月）

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/JP2024/003003

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
CN 114970322 A	30.08.2022	(ファミリーなし)	