

【公報種別】 特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載

【部門区分】 第 6 部門第 3 区分

【発行日】 令和 5 年 6 月 16 日 (2023.6.16)

【国際公開番号】 WO2022/260179

【出願番号】 特願 2023-524992 (P2023-524992)

【国際特許分類】

G 1 6 C 2 0 / 7 0 (2 0 1 9 . 0 1)

【 F I 】

G 1 6 C 2 0 / 7 0

10

【手続補正書】

【提出日】 令和 5 年 4 月 24 日 (2023.4.24)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】 特許請求の範囲

【補正対象項目名】 全文

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

20

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、

表面及び当該表面に近接した吸着分子を含む第 1 原子構造を訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第 1 原子構造のエネルギーと、前記第 1 原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第 1 誤差を取得し、

クラスタ及び当該クラスタに近接した吸着分子を含む第 4 原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第 4 原子構造のエネルギーと、前記第 4 原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第 4 誤差を取得し、

30

前記第 1 誤差及び前記第 4 誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新し、

前記表面および前記クラスタは、同一原子を含む、

訓練装置。

【請求項 2】

前記クラスタの原子構造の有する原子数は、前記表面の原子構造の有する原子数よりも少ない、

請求項 1 に記載の訓練装置。

【請求項 3】

前記 1 又は複数のプロセッサは、さらに、

40

吸着分子の第 2 原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第 2 原子構造のエネルギーと、前記第 2 原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第 2 誤差を取得し、

前記第 2 誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する、

請求項 1 に記載の訓練装置。

【請求項 4】

前記 1 又は複数のプロセッサは、さらに、

前記表面の第 3 原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第 3 原子構造のエネルギーと、前記第 3 原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第 3 誤差を取得し、

50

前記第3誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する、
請求項1に記載の訓練装置。

【請求項5】

前記1又は複数のプロセッサは、さらに、

前記クラスタに関する第5原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力されるエネルギーと、前記第5原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第5誤差を取得し、

前記第5誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する、
請求項1に記載の訓練装置。

【請求項6】

前記1又は複数のプロセッサは、

原子構造について、前記訓練対象モデルから出力された当該原子構造のエネルギーと、当該原子構造のエネルギーの正解値と、の差を、当該原子構造に含まれる原子数又は原子数の2乗で除算して誤差を算出する、

請求項1に記載の訓練装置。

【請求項7】

原子構造のエネルギーの正解値は、当該原子構造について量子化学計算を実行して取得される、

請求項1に記載の訓練装置。

【請求項8】

前記量子化学計算は、第一原理計算である、

請求項7に記載の訓練装置。

【請求項9】

前記第一原理計算は、密度汎関数法、ハートリーフォック法又はメラープレセット法を使った計算である、

請求項8に記載の訓練装置。

【請求項10】

前記訓練対象モデルは、原子間ポテンシャルを表すためのニューラルネットワークモデルである、

請求項1に記載の訓練装置。

【請求項11】

前記第1原子構造に含まれる吸着分子と前記第4原子構造に含まれる吸着分子とは同一である、請求項1に記載の訓練装置。

【請求項12】

前記表面および前記クラスタに含まれる前記同一原子とは、同一の元素記号の原子のことである、請求項1に記載の訓練装置。

【請求項13】

請求項1から請求項12のいずれかに記載の訓練装置を用いて前記訓練対象モデルを訓練することで訓練済みモデルを生成する方法。

【請求項14】

訓練対象モデルのパラメータを更新して訓練済みモデルを生成する方法であって、

表面及び当該表面に近接した吸着分子を含む第1原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第1原子構造のエネルギーと、前記第1原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第1誤差を取得する工程と、

クラスタ及び当該クラスタに近接した吸着分子を含む第4原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第4原子構造のエネルギーと、前記第4原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第4誤差を取得する工程と、

前記第1誤差及び前記第4誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する工程と、

を有し、

10

20

30

40

50

前記表面および前記クラスタは、同一原子を含む、
方法。

【請求項 15】

表面及び当該表面に近接した吸着分子を含む第1原子構造を訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第1原子構造のエネルギーと、前記第1原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第1誤差を取得する工程と、

クラスタ及び当該クラスタに近接した吸着分子を含む第4原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される前記第4原子構造のエネルギーと、前記第4原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて第4誤差を取得する工程と、

前記第1誤差及び前記第4誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する工程と、

を有する方法であって、

前記表面および前記クラスタは、同一原子を含む、前記方法を、1又は複数のプロセッサに実行させるためのプログラム。

【請求項 16】

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、

入力された原子構造のエネルギーを出力する訓練済みモデルに、表面及び当該表面に近接した吸着分子を含む第1原子構造、前記吸着分子の第2原子構造、前記表面の第3原子構造のそれぞれを入力し、

前記吸着分子の前記表面に対する吸着エネルギーは、前記訓練済みモデルから出力される、前記第1原子構造、前記第2原子構造、前記第3原子構造のそれぞれのエネルギーに基づいて計算され、

前記訓練済みモデルは、

表面及び当該表面に近接した吸着分子を含む原子構造を訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される当該原子構造のエネルギーと、当該原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて誤差を取得する工程と、クラスタ及び当該クラスタに近接した吸着分子を含む原子構造を前記訓練対象モデルに入力して当該訓練対象モデルから出力される当該原子構造のエネルギーと、当該原子構造のエネルギーの正解値と、に基づいて誤差を取得する工程と、当該2つの誤差に基づいて、前記訓練対象モデルのパラメータを更新する工程と、を有し、当該表面および当該クラスタは、同一原子を含む、方法によって訓練された当該訓練対象モデルである、

推論装置。

【請求項 17】

前記訓練対象モデルの訓練において、前記クラスタの原子構造の有する原子数は、前記表面の原子構造の有する原子数よりも少ない、

請求項 16 に記載の推論装置。

【請求項 18】

前記訓練済みモデルは、入力された原子構造を構成する各原子に働く力を計算可能であり、

前記1又は複数のプロセッサは、

前記訓練済みモデルに、前記第1原子構造を入力して計算した力に基づいて、前記第1原子構造を最適化し、

前記吸着エネルギーの計算のために、前記訓練済みモデルに、最適化した前記第1原子構造を入力する、

請求項 16 に記載の推論装置。

【請求項 19】

前記1又は複数のプロセッサは、

10

20

30

40

50

前記第1原子構造の最適化を繰り返し実行する、
請求項18に記載の推論装置。

【請求項20】

前記吸着エネルギーは、前記訓練済みモデルから出力された前記第2原子構造のエネルギー及び前記第3原子構造のエネルギーの和から、前記訓練済みモデルから出力された前記第1原子構造のエネルギーを減算することで計算される、

請求項16に記載の推論装置。

【請求項21】

前記訓練済みモデルは、原子間ポテンシャルを表すためのニューラルネットワークモデルである、

請求項16に記載の推論装置。

【請求項22】

前記表面および前記クラスタに含まれる前記同一原子は、同一の元素記号の原子のことである、請求項16から請求項21のいずれかに記載の推論装置。

10

20

30

40

50