

【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9月21日(2023.9.21)

【国際公開番号】WO2022/260177  
【出願番号】特願2023-527952(P2023-527952)  
【国際特許分類】  
G16C20/70(2019.01)  
【FI】  
G16C20/70

10

【手続補正書】  
【提出日】令和5年7月12日(2023.7.12)  
【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、  
原子系の各原子の情報を第2モデルに入力し、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーとの差分を推定する、  
推定装置。

【請求項2】

前記各原子の情報は、少なくとも原子の3次元座標の情報または原子間の相対位置の情報を含む、  
請求項1に記載の推定装置。

30

【請求項3】

前記1又は複数のプロセッサは、  
前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーと前記差分の推定値との和を出力する、  
請求項1に記載の推定装置。

【請求項4】

前記1又は複数のプロセッサは、  
前記和から前記原子系に対応する力を出力する、  
請求項3に記載の推定装置。

40

【請求項5】

前記1又は複数のプロセッサは、  
前記原子系の各原子の情報から、前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーを計算する、  
請求項3に記載の推定装置。

【請求項6】

前記1又は複数のプロセッサは、  
前記原子系の各原子の情報を第1モデルに入力し、前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーを推定し、

50

前記差分の推定処理として、前記原子系の各原子の情報を前記第 2 モデルに入力し、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記第 1 モデルを用いて推定したエネルギーとの差分を推定する、

請求項 1 に記載の推定装置。

【請求項 7】

前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記第 1 モデルを用いて推定したエネルギーと前記第 2 モデルを用いて推定した差分との和を出力する、

請求項 6 に記載の推定装置。

【請求項 8】

10

前記 1 又は複数のプロセッサは、

前記原子系の各原子について、2 原子の組合せを抽出し、前記第 1 モデルに入力する、

請求項 6 に記載の推定装置。

【請求項 9】

前記第一原理計算に基づく計算は、DFTにより行われる、

請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 項に記載の推定装置。

【請求項 10】

前記原子間ポテンシャル関数は、Lennard Jonesポテンシャルである、

請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 項に記載の推定装置。

【請求項 11】

20

前記原子間ポテンシャル関数は、2 体ポテンシャル関数である、

請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 項に記載の推定装置。

【請求項 12】

前記原子間ポテンシャル関数は、3 体以上の原子間ポテンシャル関数である、

請求項 1 乃至 8 のいずれか 1 項に記載の推定装置。

【請求項 13】

請求項 1 乃至請求項 8 のいずれか 1 項に記載の推定装置を用いて、前記差分を推定する方法。

【請求項 14】

前記第一原理計算に基づく計算は、DFTにより行われる、

請求項 13 に記載の方法。

30

【請求項 15】

前記原子間ポテンシャル関数は、Lennard Jonesポテンシャルである、

請求項 13 に記載の方法。

【請求項 16】

前記原子間ポテンシャル関数は、2 体ポテンシャル関数である、

請求項 13 に記載の方法。

【請求項 17】

前記原子間ポテンシャル関数は、3 体以上の原子間ポテンシャル関数である、

請求項 13 に記載の方法。

40

【請求項 18】

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、

原子系の各原子の情報を入力すると、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーとの差分の推定値を出力する第 2 モデルを訓練する、

訓練装置。

【請求項 19】

50

前記各原子の情報は、少なくとも原子の3次元座標の情報または原子間の相対位置の情報を含む、

請求項18に記載の訓練装置。

【請求項20】

前記1又は複数のプロセッサは、

前記原子系の各原子の情報を入力すると、前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーの推定値を出力する第1モデルを訓練し、

前記第2モデルは、前記差分の推定値として、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記第1モデルを用いて推定したエネルギーとの差分の推定値を出力するよう訓練されている、

請求項18に記載の訓練装置。

10

【請求項21】

前記1又は複数のプロセッサは、

前記原子系の各原子について、2原子の組合せを抽出し、前記第1モデルに入力する、

請求項20に記載の訓練装置。

【請求項22】

前記原子間ポテンシャル関数は、2体ポテンシャル関数である、

請求項18乃至21のいずれか1項に記載の訓練装置。

【請求項23】

前記原子間ポテンシャル関数は、3体以上の原子間ポテンシャル関数である、

請求項18乃至21のいずれか1項に記載の訓練装置。

20

【請求項24】

請求項18乃至21のいずれか1項に記載の訓練装置を用いて、前記第2モデルを生成する方法。

【請求項25】

1又は複数のプロセッサに、

原子系の各原子の情報を第2モデルに入力させ、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーとの差分を推定させる、

プログラム。

30

【請求項26】

1又は複数のプロセッサに、

原子系の各原子の情報を入力すると、前記原子系に対応する原子間ポテンシャル関数のエネルギーの推定値を出力する第1モデルを訓練させ、

前記原子系の各原子の情報を入力すると、前記原子系に対応する第一原理計算に基づくエネルギーと前記第1モデルを用いて推定したエネルギーとの差分の推定値を出力する第2モデルを訓練させる、

プログラム。

40

50