



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 118974837 A

(43) 申请公布日 2024. 11. 15

(21) 申请号 202380029388.5

(74) 专利代理机构 北京市中咨律师事务所
11247

(22) 申请日 2023.01.23

专利代理师 张洁 段承恩

(30) 优先权数据

2022-057910 2022.03.31 JP

(51) Int.Cl.

G16C 60/00 (2006.01)

(85) PCT国际申请进入国家阶段日

2024.09.23

(86) PCT国际申请的申请数据

PCT/JP2023/001943 2023.01.23

(87) PCT国际申请的公布数据

W02023/188731 JA 2023.10.05

(71) 申请人 松下知识产权经营株式会社

地址 日本

(72) 发明人 横山智康 市川和秀

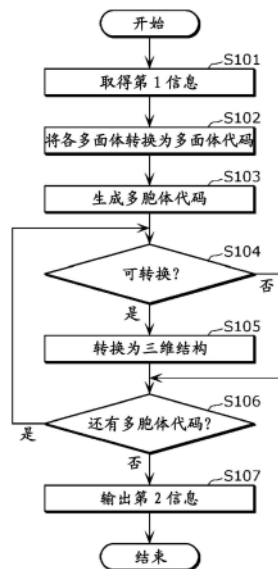
权利要求书3页 说明书25页 附图38页

(54) 发明名称

信息处理方法、信息处理系统以及程序

(57) 摘要

信息处理方法是计算机执行的信息处理方法,包括:取得与多个多面体有关的第1信息的步骤(S101);基于第1信息生成与使多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤(S102~S106);和输出所生成的第2信息的步骤(S107)。三维结构是具有无空隙地配置有多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。



1. 一种信息处理方法,是计算机执行的信息处理方法,包括:
取得与多个多面体有关的第1信息的步骤;
基于所述第1信息生成与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤;和
输出所生成的所述第2信息的步骤,
所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。
2. 根据权利要求1所述的信息处理方法,
所述第2信息包含如下信息中的至少一个:表示所述三维结构的信息;表示表现所述三维结构的包含数字或者文字的数列的信息;和表示表现所述三维结构的周期图的信息。
3. 根据权利要求1所述的信息处理方法,
在取得所述第1信息的步骤中,取得单位结构信息作为所述第1信息,所述单位结构信息表示无空隙地配置有所述多个多面体的单位结构的形状,
在生成所述第2信息的步骤中,生成表示配置有所述单位结构信息所表示的至少一个所述单位结构的所述三维结构的所述第2信息。
4. 根据权利要求3所述的信息处理方法,
所述单位结构信息是表示所述晶体结构中的布拉维格子的信息。
5. 根据权利要求1至4中任一项所述的信息处理方法,
在取得所述第1信息的步骤中,取得对称性信息作为所述第1信息,所述对称性信息表示所述三维结构的对称性,
在生成所述第2信息的步骤中,生成与具有所述对称性信息所表示的对称性的所述三维结构有关的第2信息。
6. 根据权利要求5所述的信息处理方法,
所述对称性信息是表示所述晶体结构中的空间群的信息。
7. 根据权利要求1至6中任一项所述的信息处理方法,
在取得所述第1信息的步骤中,取得形状信息作为所述第1信息,所述形状信息表示所述多个多面体各自的形状,
在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面体无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。
8. 根据权利要求7所述的信息处理方法,
在取得所述第1信息的步骤中,还取得个数信息作为所述第1信息,所述个数信息表示所述多个多面体的每个形状的数量,
在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面体按所述个数信息所表示的每个形状的数量无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。
9. 根据权利要求7所述的信息处理方法,
在取得所述第1信息的步骤中,还取得构成比信息作为所述第1信息,所述构成比信息表示所述多个多面体的每个形状的构成比,
在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面

体按所述构成比信息所表示的每个形状的构成比无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。

10. 根据权利要求7至9中任一项所述的信息处理方法,

在取得所述第1信息的步骤中,还取得变形度信息作为所述第1信息,所述变形度信息表示所述多个多面体的形状的所容许的变形度,

在生成所述第2信息的步骤中,生成与以不超过所述变形度信息所表示的变形度的方式使所述多个多面体的至少一部分变形而得到的所述三维结构有关的第2信息。

11. 根据权利要求10所述的信息处理方法,

以所述形状信息所表示的多面体的形状为基准,基于所述多面体的重心位置、所述多面体的至少一个顶点的位置、所述多面体的至少一条边的长度、所述多面体的至少两条边所成的角度、和所述多面体的至少一个面的面积中的至少一个,决定所述变形度。

12. 根据权利要求1至11中任一项所述的信息处理方法,

生成所述第2信息的步骤包括:

将所取得的所述第1信息转换为分别表示所述多个多面体的多个第1数列的步骤;和

将使用转换出的所述多个第1数列生成的表示多胞体的第2数列转换为所述三维结构的步骤。

13. 根据权利要求1至11中任一项所述的信息处理方法,

生成所述第2信息的步骤包括:

将所取得的所述第1信息转换为分别表示所述多个多面体的多个多面体图的步骤;和

将使用转换出的所述多个多面体图生成的周期图转换为所述三维结构的步骤。

14. 根据权利要求1至13中任一项所述的信息处理方法,

在取得所述第1信息的步骤中,取得与材料的组成有关的材料信息作为所述第1信息。

15. 根据权利要求14所述的信息处理方法,

所述材料信息包含所述材料所含有的原子和所述材料的组成中的至少一方,

在取得所述第1信息的步骤中,还取得与所述原子在所述三维结构中的配置有关的配置信息作为所述第1信息,

在生成所述第2信息的步骤中,基于所述配置信息所表示的所述原子的配置,生成与所述三维结构有关的所述第2信息。

16. 根据权利要求14或15所述的信息处理方法,

在生成所述第2信息的步骤中所生成的所述三维结构是所述材料的组成可取的所述晶体结构。

17. 一种信息处理系统,具备:

显示部,其显示用于受理与多个多面体有关的第1信息的输入的第1图像;以及

显示控制部,其使所述显示部显示表示第2信息的第2图像,所述第2信息是基于输入的所述第1信息所生成的、与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的信息,

所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

18. 一种程序,使计算机执行:

取得与多个多面体有关的第1信息的步骤;

基于所述第1信息生成与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤;和

输出所生成的所述第2信息的步骤,

所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

信息处理方法、信息处理系统以及程序

技术领域

[0001] 本公开涉及生成三维结构的技术等。

背景技术

[0002] 空间填充(平铺(tiling)或者镶嵌(tessellation))是指将空间内用图形无空隙(间隙、缝隙)地填满的操作。例如,二维空间中的空间填充被称为平面填充,是指将平面图形在二维空间无空隙地填满的操作。

[0003] 专利文献1公开了生成三维立体的方法。

[0004] 非专利文献1公开了多面体代码(code)以及多胞体(四维体)代码。

[0005] 现有技术文献

[0006] 专利文献

[0007] 专利文献1:日本特表2018-516794号公报

[0008] 非专利文献

[0009] 非专利文献1:Kengo,N.,&Takahide,(2016).How to describe disordered structures,Scientific Reports,6,23455.

发明内容

[0010] 本公开提供能够生成三维空间中的空间填充结构的信息处理方法等。

[0011] 本公开的一个技术方案涉及的信息处理方法是计算机执行的信息处理方法,包括:取得与多个多面体有关的第1信息的步骤;基于所述第1信息生成与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤;和输出所生成的所述第2信息的步骤,所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

[0012] 根据本公开,能够生成三维空间中的空间填充结构。

附图说明

[0013] 图1是表示由多个多面体生成的三维结构的一例的图。

[0014] 图2是表示由多个多面体生成的三维结构的另一例的图。

[0015] 图3是表示由多个多面体生成的三维结构的又一例的图。

[0016] 图4是表示由三维结构生成的晶体结构的一例的图。

[0017] 图5是表示包括实施方式1涉及的信息处理系统的整体构成的框图。

[0018] 图6是表示保存于第1存储部的多面体数据的一例的图。

[0019] 图7是表示保存于第2存储部的第2信息的一例的图。

[0020] 图8是表示在实施方式1的第1使用例中显示于显示部的图像的图。

[0021] 图9是表示在实施方式1的第1使用例中显示于显示部的图像的图。

[0022] 图10是表示布拉维(Bravais)格子的一览表的图。

- [0023] 图11是表示在实施方式1的第2使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0024] 图12是表示三维结构的对称性的一例的图。
- [0025] 图13是表示在实施方式1的第3使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0026] 图14是表示在实施方式1的第4使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0027] 图15是表示在实施方式1的第5使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0028] 图16是表示多面体的变形(歪斜、失真)度的一例的图。
- [0029] 图17是表示具有变形的三维结构的一例的图。
- [0030] 图18是表示实施方式1涉及的信息处理系统的动作例的流程图。
- [0031] 图19是表示从多面体生成多面体代码的过程的一例的流程图。
- [0032] 图20是表示从正四面体生成多面体代码的过程的一例的图。
- [0033] 图21是表示从正八面体生成多面体代码的过程的一例的图。
- [0034] 图22是表示从立方八面体生成多面体代码的过程的一例的图。
- [0035] 图23是表示从多面体代码生成多胞体代码的过程的一例的流程图。
- [0036] 图24是表示从多胞体代码生成三维结构的过程的一例的流程图。
- [0037] 图25是表示多胞体代码的具体例的图。
- [0038] 图26是表示从多胞体代码生成三维结构的过程的具体例的图。
- [0039] 图27是表示实施方式1涉及的信息处理系统以及显示部、第1存储部、第2存储部的动作例的时序图。
- [0040] 图28是表示实施方式1涉及的信息处理系统的另一动作例的流程图。
- [0041] 图29是表示将多面体转换为多面体图(graph)的过程的具体例的图。
- [0042] 图30是表示将周期图转换为三维结构的情况的具体例的图。
- [0043] 图31是表示在实施方式2的第1使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0044] 图32是表示在实施方式2的第1使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0045] 图33是表示在实施方式2的第1使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0046] 图34是表示实施方式2涉及的信息处理系统以及显示部、第1存储部、第2存储部的第1动作例的时序图。
- [0047] 图35是表示在实施方式2的第2使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0048] 图36是表示在实施方式2的第2使用例中显示于显示部的图像的图。
- [0049] 图37是表示实施方式2涉及的信息处理系统以及显示部、第1存储部、第2存储部的第2动作例的时序图。
- [0050] 图38是表示正四面体的面₁的边a、边b、边c的图。
- [0051] 图39是表示正四面体的面₁的图。
- [0052] 图40是表示正八面体的面₁的边a、边b、边c的图。
- [0053] 图41是表示正八面体的面₂的图。
- [0054] 图42是表示正八面体的面₅的图。
- [0055] 图43是表示正八面体的面₆的图。
- [0056] 图44是表示立方八面体的面₁的边a、边b、边c的图。
- [0057] 图45是表示立方八面体的面₂的图。
- [0058] 图46是表示立方八面体的面₆的图。

[0059] 图47是表示立方八面体的面₇的图。

具体实施方式

[0060] (得到本公开的见解)

[0061] 以往,发现了很多二维空间中的空间填充结构。另一方面,即使是很久以前就被应用的二维空间中的空间填充结构,也存在未知的空间填充结构,例如近年来有由五边形构成的新的二维空间中的空间填充结构被报告等。

[0062] 另外,除了二维空间中的空间填充结构之外,也存在三维空间中的空间填充结构。以下,将三维空间中的空间填充结构称为“三维结构”。三维结构是在三维空间中无空隙地填满多面体等多个立体的结构。在此,三维结构特别是指,具有多个多面体无空隙地配置于三维空间的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。也即是说,三维结构既可以是晶体结构本身,也可以是能够表现晶体结构的结构。此外,“无空隙地配置有多个多面体”是指,在多个多面体中的任一多面体中,与其他多面体相接的面的各顶点都位于与在该其他多面体中与该多面体相接的面的各顶点相同的位置。

[0063] 再者,近年来,三维结构开始被用于表现材料的结构。材料的结构具体是指,如晶体(结晶)材料或者非晶(无定形)材料之类的材料的微观结构等。特别是,在无机材料的结构中,某个原子与多个相邻的原子配位,并被它们包围而存在。而且,无机材料的结构通过将多个相邻的原子各自的中心连结而成的多面体(配位多面体)无空隙地填充三维空间而构成。也即是说,无机材料的结构可以被视为三维结构。

[0064] 另外,根据被填充的配位多面体的组合,存在多种多样的三维结构。图1是表示由多个多面体生成的三维结构的一例的图。例如,在由图1的(a)所示的2个正四面体和1个正八面体生成的三维结构中,由于其层叠的不同而存在图1的(b)所示的面心立方格子结构(fcc型结构)和图1的(c)所示的六方密排填充结构(hcp型结构)这两种。图2是表示由多个多面体生成的三维结构的另一例的图。例如,在由图2的(a)所示的1个正四面体生成的三维结构中,由于其层叠的不同而存在图2的(b)所示的体心立方格子结构(bcc型结构)和图2的(c)所示的MgCu₂型结构这两种。图3是表示由多个多面体生成的三维结构的又一例的图。例如,在由图3的(a)所示的1个正八面体和1个立方八面体生成的三维结构中,存在图3的(b)所示的钙钛矿结构。此外,在图3的(b)中,图示了1个立方八面体,但实际上在位于中心的正八面体的周围无空隙地配置有多个立方八面体。

[0065] 然而,要找到未知的三维结构是困难的。

[0066] 例如,专利文献1公开了生成允许有空隙的三维空间图形的方法。然而,专利文献1中没有公开生成无空隙地配置有多个多面体的三维结构的方法。

[0067] 另外,非专利文献1公开了用数列记述多面体的多面体代码以及用数列记述多胞体的多胞体代码。然而,非专利文献1中没有公开使用它们生成无空隙地配置有多个多面体的三维结构的技术。

[0068] 为了解决上述的问题,本公开的一个技术方案涉及的信息处理方法是计算机执行的信息处理方法,包括:取得与多个多面体有关的第1信息的步骤;基于所述第1信息生成与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤;和输出所生成的所述第2信息的步骤,所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置

有原子的情况下成为晶体结构的结构。

[0069] 由此,能够生成三维空间中的空间填充结构。

[0070] 另外,例如也可以,所述第2信息包含如下信息中的至少一个:表示所述三维结构的信息;表示表现所述三维结构的包含数字或者文字的数列的信息;和表示表现所述三维结构的周期图的信息。

[0071] 由此,能够生成三维空间中的空间填充结构。

[0072] 另外,例如也可以,在取得所述第1信息的步骤中,取得单位结构信息作为所述第1信息,所述单位结构信息表示无空隙地配置有所述多个多面体的单位结构的形状,在生成所述第2信息的步骤中,生成表示配置有所述单位结构信息所表示的至少一个所述单位结构的所述三维结构的所述第2信息。

[0073] 由此,例如能够在用户指定的单位结构的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0074] 另外,也可以,所述单位结构信息是表示所述晶体结构中的布拉维格子的信息。

[0075] 由此,例如能够在用户指定的布拉维格子的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0076] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,取得对称性信息作为所述第1信息,所述对称性信息表示所述三维结构的对称性,在生成所述第2信息的步骤中,生成与具有所述对称性信息所表示的对称性的所述三维结构有关的第2信息。

[0077] 由此,例如能够在用户指定的对称性的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0078] 另外,也可以,所述对称性信息是表示所述晶体结构中的空间群的信息。

[0079] 由此,例如能够在用户指定的空间群的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0080] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,取得形状信息作为所述第1信息,所述形状信息表示所述多个多面体各自的形状,在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面体无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。

[0081] 由此,例如能够在用户指定的多个多面体各自的形状的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0082] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,还取得个数信息作为所述第1信息,所述个数信息表示所述多个多面体的每个形状的数量,在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面体按所述个数信息所表示的每个形状的数量无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。

[0083] 由此,例如能够在用户指定的多个多面体的每个形状的数量限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0084] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,还取得构成比信息作为所述第1信息,所述构成比信息表示所述多个多面体的每个形状的构成比,在生成所述第2信息的步骤中,生成与使所述形状信息所表示的形状的所述多个多面体按所述构成比信息所表示的每个形状的构成比无空隙地进行配置而得到的所述三维结构有关的所述第2信息。

[0085] 由此,例如能够在用户指定的多个多面体的每个形状的构成比的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0086] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,还取得变形度信息作为所述第1信息,所述变形度信息表示所述多个多面体的形状的所容许的变形度,在生成所述第2信息的步骤中,生成与以不超过所述变形度信息所表示的变形度的方式使所述多个多面体的至少一部分变形而得到的所述三维结构有关的第2信息。

[0087] 由此,例如能够在用户指定的多个多面体的形状的所容许的变形度的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0088] 另外,也可以,以所述形状信息所表示的多面体的形状为基准,基于所述多面体的重心位置、所述多面体的至少一个顶点的位置、所述多面体的至少一条边的长度、所述多面体的至少两条边所成的角度、和所述多面体的至少一个面的面积中的至少一个,决定所述变形度。

[0089] 由此,例如能够在用户指定的多个多面体的形状的所容许的变形度的限制下,生成三维空间中的空间填充结构,因此容易生成用户所期望的三维空间中的空间填充结构。

[0090] 另外,也可以,生成所述第2信息的步骤包括:将所取得的所述第1信息转换为分别表示所述多个多面体的多个第1数列的步骤;和将使用转换出的所述多个第1数列生成的表示多胞体的第2数列转换为所述三维结构的步骤。

[0091] 由此,能够根据多个多面体的信息网罗性地生成三维空间中的空间填充结构。

[0092] 另外,也可以,生成所述第2信息的步骤包括:将所取得的所述第1信息转换为分别表示所述多个多面体的多个多面体图的步骤;和将使用转换出的所述多个多面体图生成的周期图转换为所述三维结构的步骤。

[0093] 由此,能够用各种方法根据多个多面体的信息网罗性地生成三维空间中的空间填充结构。

[0094] 另外,也可以,在取得所述第1信息的步骤中,取得与材料的组成有关的材料信息作为所述第1信息。

[0095] 由此,能够生成关于用户想要探索(搜索)的材料的三维空间中的空间填充结构。

[0096] 另外,也可以,所述材料信息包含所述材料所含有的原子和所述材料的组成中的至少一方,在取得所述第1信息的步骤中,还取得与所述原子在所述三维结构中的配置有关的配置信息作为所述第1信息,在生成所述第2信息的步骤中,基于所述配置信息所表示的所述原子的配置,生成与所述三维结构有关的所述第2信息。

[0097] 由此,能够生成关于用户想要探索的材料的三维空间中的空间填充结构。

[0098] 另外,也可以,在生成所述第2信息的步骤中所生成的所述三维结构是所述材料的组成可取的所述晶体结构。

[0099] 由此,能够生成关于用户想要探索的材料的晶体结构。

[0100] 另外,本公开的一个技术方案涉及的信息处理系统具备:显示部,其显示用于受理与多个多面体有关的第1信息的输入的第1图像;以及显示控制部,其使所述显示部显示表示第2信息的第2图像,所述第2信息是基于输入的所述第1信息所生成的、与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的信息,所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

[0101] 由此,用户能够确认所生成的三维空间中的空间填充结构。

[0102] 另外,本公开的一个技术方案涉及的程序使计算机执行:取得与多个多面体有关的第1信息的步骤;基于所述第1信息生成与使所述多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息的步骤;和输出所生成的所述第2信息的步骤,所述三维结构是具有无空隙地配置有所述多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

[0103] 由此,能够生成三维空间中的空间填充结构。

[0104] 另外,也能够作为使计算机执行本公开的信息处理方法所包含的特征性处理的计算机程序来实现。而且,毫无疑问也可以使这种计算机程序经由CD-ROM等计算机可读的非瞬时性的记录介质或者互联网等通信网络来流通。

[0105] 即,根据本公开的技术,通过输入多个多面体的信息,能够网罗性地生成组合所输入的多个多面体而成的三维结构。该信息处理方法在进行材料探索的情况下更有效。

[0106] 在此,电子传导、离子传导或者热传导等材料的物性在很大程度上取决于原子是如何与周围的原子配位的、也即是说原子的局部的配位环境。例如,在离子性晶体材料的情况下,阳离子被一群阴离子包围。将连结该阴离子的中心而成的多面体称为配位多面体。例如,AgI采取Ag离子传导性低的fcc型结构和Ag离子传导性高的bcc型结构。在fcc型结构中,Ag离子周围的I离子填充四面体和八面体的配位多面体而构成。Ag离子由于在八面体位点(Site)更稳定,因此无法移动到旁边的四面体位点,Ag离子难以传导。另一方面,在bcc型结构中,Ag离子周围的I离子填充四面体的配位多面体而构成,所有位点是等价的,因此Ag离子易于传导。

[0107] 如此,根据被填充的配位多面体的种类,发现的材料的物性发生改变。因此,只要能指定具有高功能性的配位多面体来生成晶体结构,就能够高效地探索未知材料。即,能够生成迄今为止没有报告的晶体结构,能够发现未知的高功能性材料。而且,由于无机材料的结构可以被视为三维结构,因此能够通过输入多个多面体的信息来生成三维结构的本公开的技术对于未知材料的探索非常有效。

[0108] 以下,参照附图,具体对实施方式进行说明。

[0109] 此外,以下说明的实施方式均表示本公开的总括性的或者具体的例子。以下的实施方式中表示的数值、形状、材料、构成要素、构成要素的配置位置和连接形态、步骤、步骤的顺序等仅为一例,并非旨在限定本公开。另外,对于以下的实施方式中的构成要素中的、没有记载在表示最上位概念的独立权利要求中的构成要素,作为任意的构成要素来说明。另外,在所有实施方式中,也可以组合各自的内容。另外,各图是示意图,不一定是严格图示出的图。另外,在各图中,对相同的构成部件赋予同一标号。

[0110] 另外,本公开的实施方式涉及的信息处理系统既可以以一个计算机包含所有构成要素的方式构成,也可以构成为将多个构成要素分别分散于多个计算机的系统。

[0111] (实施方式1)

[0112] 以下,使用附图,对本公开的实施方式1涉及的信息处理系统100(信息处理方法或者程序)进行详细说明。

[0113] [三维结构的生成]

[0114] 首先,在进行实施方式1的详细说明之前,先对本公开的信息处理方法中的三维结构的生成进行说明。在本公开的信息处理方法中,通过将三维结构表现为数列或者图表

(graph),实现网罗性地生成三维结构。此外,这里所说的“数列”不仅包含数字,还包含英文字母等替换了数字的文字。

[0115] 以下,有时也将表现三维结构的数列称为“无机基因”。无机基因例如有K.Nishio等提出的多胞体代码、或者O.Delgado-Friedrichs等提出的Systre Key或D-Symbol、或者M.Krenn等人提出的将能够用英文字母序列表现分子结构的SELFIE运用于三维结构的CRYSTAL-SELFIES等。换言之,无机基因例如是可转换为三维结构的多胞体代码。

[0116] 作为一例,A型沸石(LTA)结构的多胞体代码用“OHG⁴(HG)⁴H”这一数列表示。此外,在该数列中,“O”、“H”、“G”被称为多面体代码,是根据输入的多面体确定的数列。例如“O”意味着截顶八面体,用“46⁴(46)⁴4”这一数列表示。另外,例如“H”意味着立方体,用“46”这一数列表示。另外,例如“G”意味着截顶立方八面体,用“6(48)³(64)⁶(84)³6”这一数列表示。

[0117] 通过改变该多胞体代码的排列,能够生成由相同的多个多面体构成的其他的三维结构。另外,通过改变多面体代码,能够表现任意的多面体。如此,通过使用以多胞体代码为代表的无机基因,能够根据多个多面体的信息网罗性地生成三维结构。

[0118] 而且,在这样生成的三维结构中,通过在各多面体的中心以及各多面体的顶点适当配置原子,也能够从三维结构生成晶体结构。图4是表示由三维结构生成的晶体结构的一例的图。例如,可以从图4的(a)所示的三维结构(在多胞体代码中,用“3⁴(3⁶)⁴(3⁴)⁶3⁴”表示)生成图4的(b)所示的晶体结构。

[0119] 顺便说一下,一般而言,分子结构可以表现为图表。即,分子结构可以表现为以构成化合物的“原子”为“节点”且以“原子间的结合”为连接节点的“边”的图表结构。例如,日本特开2021-081769号公报公开了将分子结构表现为图表并生成分子结构的例子。

[0120] 另一方面,晶体结构需要用周期图而非通常的图表来表现。周期图也被称为结晶网(Crystal Net),是三维地周期性的图表。在此,“三维地周期性”是指存在三个线性独立的平移。一般而言,通过定义晶体结构中的原子的结合,能够将晶体结构转换为周期图。另外,通过使用小谷/砂田理论(Kotani-Sunada,2000,Trans.Amer.Mat),周期图可以唯一地转换为晶体结构。例如,如图4的(c)所示那样具有2个独立的节点和将它们连接的4条边的周期图可以与图4的(d)所示的金刚石型结构相互转换。换言之,周期图是能够转换为三维结构的图表,该三维结构是具有无空隙地配置有多个多面体的结构、且在配置有原子的情况下成为晶体结构的结构。

[0121] [信息处理系统]

[0122] 接着,对实施方式1中使用的信息处理系统的构成进行说明。

[0123] 图5是表示包括实施方式1涉及的信息处理系统100的整体构成的框图。信息处理系统100例如构成为个人计算机或者服务器等计算机。即,信息处理系统100例如也可以通过云计算来实现。在实施方式1中,设为信息处理系统100是台式计算机进行说明。

[0124] 信息处理系统100具备取得部11、生成部12以及输出部13。另外,对信息处理系统100连接有输入部2、显示控制部30、显示部3、第1存储部4以及第2存储部5。输入部2、显示控制部30以及显示部3例如由智能手机、平板终端或者个人计算机等用户利用的信息终端构成。输入部2、显示控制部30以及显示部3也可以是由用户利用的信息终端所包含的输入部、显示控制部以及显示部。

[0125] 输入部2、显示控制部30、第1存储部4以及第2存储部5均既可以通过LAN(Local

Area Network, 局域网) 等而与信息处理系统100连接, 也可以经由例如互联网等网络而与信息处理系统100连接。

[0126] 输入部2是受理用户输入的输入接口, 例如由键盘、触摸传感器、触摸板或者鼠标等构成。输入部2受理由用户进行的输入操作, 将与该输入操作相应的信号输出到信息处理系统100。此外, 在本公开中, 显示部3以及输入部2相互独立地构成, 但也可以像触摸面板那样一体地构成。另外, 在本公开中, 信息处理系统100不具备显示部3以及输入部2, 但也可以具备它们。

[0127] 在输入部2中, 受理与多个多面体有关的第1信息的输入。第1信息例如可能包含多面体的种类、多面体的数量、容许的变形度、或者容许的对称性等。关于第1信息以及在输入部2中的第1信息的输入的详情, 稍后进行说明。

[0128] 显示控制部30基于从信息处理系统100的输出部13输出的信息, 使显示部3显示图像等。

[0129] 显示部3通过由显示控制部30控制, 显示图像等。显示部3例如是液晶显示器、等离子显示器、或者有机EL (Electro-Luminescence, 电致发光) 显示器等, 但不限于于这些。

[0130] 第1存储部4是用于存储多面体数据库的记录介质。记录介质例如是硬盘驱动器、RAM (Random Access Memory)、ROM (Read Only Memory) 或者半导体存储器等。此外, 这样的记录介质可以是易失性的, 也可以是非易失性的。多面体数据库包含多面体的图、多面体的顶点数、边数、面数或者面的形状等、与多面体有关的数据。作为收录在多面体数据库中的多面体的例子, 例如为正四面体、正六面体、正八面体、正十二面体以及正二十面体等正多面体。另外, 作为多面体的例子, 例如为截顶四面体、截顶六面体、截顶八面体、截顶十二面体、截顶二十面体、立方八面体、三十二面体 (截半二十面体)、斜方立方八面体、斜方三十二面体、斜方截顶立方八面体、斜方截顶三十二面体、变形立方体以及变形十二面体等半正多面体等。用户在输入部2中输入第1信息时使用多面体数据。

[0131] 图6是表示保存于第1存储部4的多面体数据的一例的图。图6的 (a) 表示了多面体 (在此为正八面体) 的结构, 图6的 (b) 表示了用预定的记述形式 (在此为xyz文件形式) 记述了图6的 (a) 所示的多面体的结构的数据。在第1存储部4中, 作为多面体数据, 例如保存如图6的 (a) 所示那样的表示多面体的结构的图像、和如图6的 (b) 所示那样的用预定的记述形式记述的数据。

[0132] 第2存储部5是用于存储由生成部12生成的与三维结构有关的第2信息的记录介质。记录介质例如是硬盘驱动器、RAM (Random Access Memory)、ROM (Read Only Memory) 或者半导体存储器等。此外, 这样的记录介质可以是易失性的, 也可以是非易失性的。

[0133] 图7是表示保存于第2存储部5的第2信息的一例的图。图7的 (a) 表示了第2信息所表示的三维结构 (在此为fcc型结构), 图7的 (b) 表示了用预定的记述形式 (在此为D-Symbol形式) 记述了图7的 (a) 所示的三维结构的数据。在第2存储部5中, 作为第2信息, 例如保存如图7的 (a) 所示那样的表示三维结构的图像、和如图7的 (b) 所示那样的用预定的记述形式记述的数据。第2信息例如包含三维数据、图表数据、空间群、Wycoff标签、单元大小 (cell size)、坐标、或者多面体的最大变形等。

[0134] 保存于第2存储部5的数据的文件形式 (扩展名) 例如为*.sldprt、*.sldasm、*.iam、*.ipt、*.model、*.CATPart、*.CATProduct、*.3ds或者*.max等。关于文件形式 (扩展

名),请参照“<https://www.data-henkan.com/extension-list>”这一URL表示的网站。

[0135] 取得部11取得与多个多面体有关的第1信息。取得部11是本公开的信息处理方法中的、取得第1信息的步骤的执行主体。具体而言,取得部11取得由用户在输入部2输入的第1信息。如后所述,用户一边查看显示于显示部3的用于受理第1信息的输入的第1图像,一边进行输入第1信息的操作。

[0136] 生成部12基于由取得部11取得的第1信息,生成与使多个多面体进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。生成部12是本公开的信息处理方法中的、生成第2信息的步骤的执行主体。在实施方式1中,生成部12执行将取得的第1信息转换为分别表示多个多面体的多个第1数列的处理、以及将使用转换出的多个第1数列所生成的表示多胞体的第2数列转换为三维结构的处理。即,生成部12执行将多个多面体分别转换为多面体代码(第1数列)的处理、以及将使用多个多面体代码生成的多胞体代码(第2数列)转换为三维结构的处理。关于上述各处理的详情,稍后进行说明。

[0137] 输出部13通过将图像等输出到显示控制部30,使显示部3显示图像等。另外,输出部13将生成部12生成的第2信息输出。输出部13是本公开的信息处理方法中的、输出第2信息的步骤的执行主体。具体而言,输出部13通过使显示部3显示表示由生成部12生成的第2信息的第2图像,输出第2信息。如后所述,用户一边查看显示于显示部3的第2图像,一边进行选择使第2存储部5保存的第2信息的操作。

[0138] [使用例]

[0139] 以下,列举实施方式1涉及的信息处理系统100的使用例。信息处理系统100既可以应用以下所示的第1使用例~第5使用例中的任一个,也可以将多个使用例组合而应用。另外,以下,在第2使用例~第5使用例的说明中,省略关于与第1使用例共同之处的说明。

[0140] 图8以及图9均是表示在实施方式1的第1使用例中显示于显示部3的图像的图。图8的(a)表示了显示于显示部3的第1图像的一例。第1图像通过将保存于第1存储部4的多面体数据读出而由输出部13显示于显示部3。

[0141] 在第1使用例中,第1图像包含用于选择多面体形状的形状选择区域、用于选择单位结构(在此为布拉维格子)的单位结构选择区域、和“生成三维结构”这一执行图标。

[0142] 在形状选择区域,显示出用户可选择的多个多面体、和分别与多个多面体对应的多个选择用按钮。此外,在形状选择区域中,也可以显示出各多面体的形状的名称。另外,在形状选择区域中,各多面体也可以通过动态图像而不是静态图像来显示。用户在形状选择区域中选择希望包含于三维结构的多面体。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得表示多个多面体各自的形状的形状信息作为第1信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与使形状信息所表示的形状的多个多面体无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。在图8的(a)所示的例子中,用户选择了正四面体和正八面体。因此,在该情况下,生成部12生成与使正四面体以及正八面体无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。

[0143] 此外,例如通过用户向运营信息处理系统100的运营商付费,也可以增加可选择的多种多面体的种类。在图8的(a)所示的例子中,在形状选择区域内的记为“可通过选择购买使用”的栏中,通过用户付费,新显示可选择的多种多面体。

[0144] 在单位结构选择区域,显示出用户可选择的单位结构(在此为布拉维格子)的种

类。此外,在图8的(a)所示的例子中,用户可以选择“cubic(立方晶系)”和“tetragonal(正方晶系)”中的任一方,但也可以例如从图10所示的布拉维格子的一览表中选择一个。图10是表示布拉维格子的一览表的图。

[0145] 用户在单位结构选择区域中选择单位结构(在此为布拉维格子)。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得表示无空隙地配置有多个多面体的单位结构的形状的单位结构信息作为第1信息。在此,单位结构信息是表示晶体结构中的布拉维格子的信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与使单位结构信息所表示的至少一个单位结构(在此为布拉维格子)进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。

[0146] 图8的(b)表示了显示于显示部3的第2图像的一例。第2图像在用户选择了第1图像中的执行图标、且生成部12生成与三维结构有关的第2信息之后显示于显示部3。第2图像包含表示由生成部12生成的三维结构的一览的表、和“导出所选择的三维结构”这一执行图标。在该表中,从左起依次显示:用于选择要导出的三维结构的列;显示每个三维结构的识别编号(ID)的列;表示三维结构所包含的多个多面体的每个形状的数量(在此为构成比)的列;和表示三维结构的对称性(在此为空间群)的列。

[0147] 用户选择想要保存的三维结构,并选择执行图标。由此,如图9的(a)所示,包含表示所选择的三维结构的区域、和“保存图像”这一执行图标的图像显示于显示部3。然后,用户对选择的三维结构进行确认,如果没有问题,则选择执行图标。于是,如图9的(b)所示,包含用于选择三维结构的保存形式的选择区域、和“保存”这一执行图标的图像显示于显示部3。此外,在图9的(b)所示的例子中,用户可以选择“.slbprt”和“.slbasn”中的任一方,但也可以选择其他的保存形式。通过用户选择所期望的保存形式,并选择执行图标,与用户所选择的三维结构有关的第2信息被保存于第2存储部5。

[0148] 图11是表示在实施方式1的第2使用例中显示于显示部3的图像的图。图11表示了显示于显示部3的第1图像的一例。在第2使用例中,与第1使用例不同,第1图像包含用于指定三维结构的对称性(在此为空间群)的对称性指定区域,以代替单位结构选择区域。

[0149] 在对称性指定区域,显示出用于用户指定所期望的三维结构的对称性(在此为空间群)的文本框。空间群用于记述三维结构的对称性。图12是表示三维结构的对称性的一例的图。图12的(a)所示的三维结构具有空间群编号“225”的空间群“Fm3-m”所表示的对称性。另外,图12的(b)所示的三维结构具有空间群编号“139”的空间群“14/mmm”所表示的对称性。关于空间群,请参照“https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_space_groups”这一URL表示的网站。

[0150] 用户通过在对对称性指定区域中向文本框输入所期望的空间群的编号,指定三维结构的对称性。此外,也可以在文本框中输入所期望的空间群的编号的范围。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得表示三维结构的对称性的对称性信息作为第1信息。在此,对称性信息是表示晶体结构中的空间群的信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与具有对称性信息所表示的对称性(在此为空间群)的三维结构有关的第2信息。

[0151] 此外,在第2使用例中,在第1图像的对称性指定区域,也可以列举用户可选择的多个空间群,以代替文本框。在该情况下,用户选择多个空间群中的任一个空间群即可。

[0152] 图13是表示在实施方式1的第3使用例中显示于显示部3的图像的图。图13表示了显示于显示部3的第1图像的一例。在第3使用例中,与第1使用例不同,第1图像包含用于按多面体的形状来指定三维结构所包含的多个多面体的数量的个数指定区域,以代替单位结构选择区域。

[0153] 在个数指定区域,显示出在形状选择区域中选择的多面体的形状的名称、和用于指定使三维结构包含的多面体的个数的文本框。在图13所示的例子中,用户在形状选择区域中选择了正四面体和正八面体。因此,在个数指定区域,显示用于指定正四面体的个数的文本框、和用于指定正八面体的个数的文本框。

[0154] 用户通过在个数指定区域中向文本框输入所期望的个数,指定使三维结构包含的多个多面体的个数。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会进一步取得表示多个多面体的每个形状的数量个数信息作为第1信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与使形状信息所表示的形状的多个多面体按个数信息所表示的每个形状的数量无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。

[0155] 图14是表示在实施方式1的第4使用例中显示于显示部3的图像的图。图14表示了显示于显示部3的第1图像的一例。在第4使用例中,与第1使用例不同,第1图像包含用于指定三维结构所包含的多面体的每个形状的构成比的构成比指定区域,以代替单位结构选择区域。

[0156] 在构成比指定区域,显示出在形状选择区域中选择的多面体的形状的名称、和用于指定使三维结构包含的多面体的构成比的文本框。在图14所示的例子中,用户在形状选择区域中选择了正四面体和正八面体。因此,在构成比指定区域,显示用于指定正四面体的构成比的文本框、和用于指定正八面体的构成比的文本框。

[0157] 用户通过在构成比指定区域中向文本框输入所期望的构成比,指定使三维结构包含的多个多面体的每个形状的构成比。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会进一步取得表示多个多面体的每个形状的构成比的构成比信息作为第1信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与使形状信息所表示的形状的多个多面体按构成比信息所表示的每个形状的构成比无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。

[0158] 图15是表示在实施方式1的第5使用例中显示于显示部3的图像的图。图15的(a)表示了显示于显示部3的第1图像的一例。在第5使用例中,与第3使用例不同,第1图像包含用于指定多个多面体的形状的所容许的变形度的变形度指定区域。

[0159] 在此,变形度表示以形状信息所表示的多面体的形状、也即是说在形状选择区域中显示的多面体的形状为基准,使该多面体的形状变了形的情况下的其程度。例如,变形度是以形状信息所表示的多面体的形状为基准,基于多面体的重心位置、多面体的至少一个顶点的位置、多面体的至少一条边的长度、多面体的至少两条边所成的角度、和多面体的至少一个面的面积中的至少一个而决定的。

[0160] 例如,在使形状信息所表示的形状的多面体组合在一起时,存在不能无空隙地配置多个多面体的情况。在这种情况下,通过使多个多面体中的至少一个以上的多面体的形状变形,可以无空隙地配置多个多面体。于是,在第5使用例中,生成部12在用户容许的变形度的范围内,尝试生成三维结构。

[0161] 变形度例如使用Baur的方法,由以下的式(1)表示。在式(1)中,“D”表示变形度,“ l_i ”表示多面体的中心到第i个顶点的距离,“ l_{av} ”表示多面体的中心到顶点的平均距离。

$$[0162] \quad D = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|l_i - l_{av}|}{l_{av}} \dots (1)$$

[0163] 另外,变形度例如使用Robinson的方法(quadratic elongation),由以下的式(2)表示。在式(2)中,“ λ ”表示变形度,“ l_i ”表示多面体的中心到第i个顶点的距离,“ l_0 ”表示相同体积的正多面体的中心到顶点的距离。

$$[0164] \quad \lambda = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{l_i}{l_0} \right)^2 \dots (2)$$

[0165] 图16是表示多面体的变形度的一例的图。图16的(a)表示变形度“D”为“0.0”的情况下、也即是说没有变形的多面体(在此为正四面体)的形状。另一方面,图16的(b)表示变形度“D”为“0.00869”的情况下、也即是说有变形的多面体(在此为正四面体的形状)。图17是表示有变形的三维结构的一例的图。图17表示使多个有变形的多面体(在此为使正四面体变形得到的多面体)无空隙地进行配置而得到的三维结构(在此为bcc型结构)。

[0166] 在变形度指定区域,显示出用于指定多个多面体的形状的所容许的变形度的文本框。用户通过在变形度指定区域中向文本框输入所期望的变形度,指定多个多面体的形状的所容许的变形度。此外,也可以在文本框中输入所期望的变形度的范围。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会进一步取得表示多个多面体的形状的所容许的变形度的变形度信息作为第1信息。在该情况下,用户选择了执行图标时,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与以不超过变形度信息所表示的变形度的方式使多个多面体的至少一部分变形而得到的三维结构有关的第2信息。

[0167] 图15的(b)表示了显示于显示部3的第2图像的一例。在第5使用例中,第2图像与第1使用例不同,在表示由生成部12生成的三维结构的一览的表中,还包括显示合计变形的列,该合计变形是三维结构所具有的变形的合计。

[0168] [动作]

[0169] 以下,对实施方式1涉及的信息处理系统100的动作(也即是说信息处理方法)进行说明。图18是表示实施方式1涉及的信息处理系统100的动作例的流程图。

[0170] (步骤S101)

[0171] 取得部11取得第1信息。如上所述,第1信息通过用户一边查看读出保存于第1存储部4的多面体数据而显示于显示部3的第1图像、一边使用输入部2进行输入(选择)来由取得部11取得。此外,第1信息也可以通过用户不参照第1图像而使用输入部2输入原始数据来由取得部11取得。

[0172] (步骤S102)

[0173] 生成部12执行将由取得部11取得的第1信息转换为分别表示多个多面体的多个第1数列的处理。在此,生成部12将第1信息所包含的各多面体转换为多面体代码。

[0174] (步骤S103)

[0175] 生成部12执行使用转换出的多个第1数列生成表示多胞体的第2数列的处理。在此,生成部12基于通过转换而得到的多个多面体代码,生成多个多胞体代码。

[0176] (步骤S104)

[0177] 生成部12判定所生成的多胞体代码能否转换为三维结构。生成部12例如能够根据彼此相接的2个多面体的面是否相同、多个多面体是否被无空隙地进行了配置(换言之,填充率是否为100%),判定多胞体代码能否向三维结构转换。在判定为能够转换的情况下(步骤S104:是),生成部12接着执行步骤S105。在判定为不能转换的情况下(步骤S104:否),生成部12接着执行步骤S106。

[0178] (步骤S105)

[0179] 生成部12执行将多胞体代码转换为三维结构的处理。在转换处理中,例如可以使用上述的K.Nishio等的方法或者O.Delgado-Friedrichs等的方法。生成部12接着执行步骤S106。

[0180] (步骤S106)

[0181] 生成部12判断是否存在尚未判定能否转换的多胞体代码。在存在尚未判定的多胞体代码的情况下(S106:是),生成部12回到步骤S104。在对所有多胞体代码进行了判定的情况下(S106:否),生成部12的处理完成。然后,信息处理系统100(信息处理方法)接着执行步骤S107。

[0182] (步骤S107)

[0183] 输出部13执行将由生成部12生成的第2信息输出的处理。在此,输出部13通过使显示部3显示表示由生成部12生成的第2信息的第2图像,输出第2信息。

[0184] 显示部3也可以包括显示控制部30。也可以将包括显示控制部30的显示部3称为显示部3A。输出部13也可以将生成部12生成的第2信息输出到显示部3A。由此,显示部3A也可以显示第2信息。也即是说,输出部13也可以使显示部3A显示第2信息。

[0185] 在生成部12无法将所有多胞体代码转换为三维结构的情况下,不生成第2信息。在生成部12无法将所有多胞体代码转换为三维结构的情况下,显示部3不显示第2信息。

[0186] 接着,使用附图,对将多面体转换为多面体代码的处理进行具体说明。图19是表示从多面体生成多面体代码的过程的一例的流程图。

[0187] (步骤S201)

[0188] 生成部12对多面体的任意面赋予编号“1”。

[0189] (步骤S202)

[0190] 生成部12将“1”代入变量“i”。

[0191] (步骤S203)

[0192] 生成部12对与第“i”个面邻接的面赋予编号“i+1”。

[0193] (步骤S204)

[0194] 生成部12对与第“i”以下个面邻接的变量“j”个面,从“i+1”号面起顺时针到“i+j”号面为止赋予编号。将与第“i”以下个面邻接的面的数量代入变量“j”。

[0195] (步骤S205)

[0196] 生成部12判断是否已对多面体的所有面赋予了编号。在对多面体的所有面赋予了编号的情况下(步骤S205:是),生成部12接着执行步骤S209。在尚未对多面体的所有面赋予编号的情况下(步骤S205:否),生成部12接着执行步骤S206。

[0197] (步骤S206)

[0198] 生成部12对与“i+1”号面邻接的未赋予编号的面赋予编号“i+j+1”。

[0199] (步骤S207)

[0200] 生成部12判断是否已对多面体的所有面赋予了编号。在对多面体的所有面赋予了编号的情况下(步骤S207:是),生成部12接着执行步骤S209。在尚未对多面体的所有面赋予编号的情况下(步骤S207:否),生成部12接着执行步骤S208。

[0201] (步骤S208)

[0202] 生成部12将“i+j”代入变量“i”。而且,生成部12回到步骤S204。

[0203] (步骤S209)

[0204] 生成部12通过按照对多面体的所有面赋予的编号顺序,将面所具有的边的数量进行排列,将各面的边的数量数列化。

[0205] (步骤S210)

[0206] 生成部12判断是否还存在其他的数列模式(pattern)。在存在其他的数列模式的情况下(步骤S210:是),生成部12回到步骤S201。在该情况下,生成部12在步骤S201中对与过去赋予了编号“1”的面不同的任意面赋予编号“1”。在不存在其他数列模式的情况下(步骤S210:否),生成部12接着执行步骤S211。

[0207] (步骤S211)

[0208] 生成部12从一个以上的数列中选择最小的数列。选择出的数列成为多面体代码。

[0209] 以下,列举将多面体转换为多面体代码的处理的具体例。

[0210] 图20是表示从正四面体生成多面体代码的过程的一例的图。首先,生成部12对任意的面赋予“1”这一编号。而且,生成部12按顺时针(左手系)对与“1”的面邻接的面依次赋予“2”、“3”、“4”这一编号。

[0211] 在图20中,设被赋予编号“1”的面为面₁、被赋予编号“2”的面为面₂、被赋予编号“3”的面为面₃、被赋予编号“4”的面为面₄。面₁在图20所示的各正四面体中是右边跟前的面。将面₁所具有的3条边按顺时针命名为边a、边b、边c。图38是表示正四面体的面₁的边a、边b、边c的图。图39是表示正四面体的面₁的图。在图39中,面₁被涂满了黑色。面₂与面₁共享边a,面₃与面₁共享边b,面₄与面₁共享边c。

[0212] 由此,对所有面都赋予了编号,因此,生成部12按编号顺序将面的边的数量作为项进行数列化。也即是说,如果面为三角形,则为3条边,因此与该面对应的项成为“3”。因此,表示正四面体的各面的数列按编号从“1”到“4”的顺序成为“3333=3⁴”。在该情况下,由于不存在其他的数列模式,因此正四面体被转换为多面体代码“3⁴”。

[0213] 图21是表示从正八面体生成多面体代码的过程的一例的图。首先,生成部12对任意的面赋予“1”这一编号。而且,生成部12按顺时针(左手系)对与“1”的面邻接的面依次赋予“2”、“3”、“4”这一编号。接着,生成部12对与“2”的面邻接且还没被赋予编号的面赋予“5”这一编号。然后,生成部12对与被赋予了“4”以下的编号的面邻接的面,从“5”的面起按顺时针(左手系)依次赋予“6”、“7”这一编号。进而,生成部12对与“5”的面邻接且还没被赋予编号的面赋予“8”这一编号。

[0214] 在图21中,设被赋予编号“1”的面为面₁、~、被赋予编号“8”的面为面₈。面₁在图21所示的各正八面体中是右边里侧的面。将面₁所具有的3条边按顺时针命名为a、b、c。图40是表示正八面体的面₁的边a、边b、边c的图。面₂与面₁共享边a,面₃与面₁共享边b,面₄与面₁共享

边c。图41是表示正八面体的面₂的图。在图41中,面₂被涂满了黑色。图42是表示正八面体的面₅的图。在图42中,面₅被涂满了黑色。图43是表示正八面体的面₆的图。在图43中,面₆被涂满了黑色。

[0215] 由此,对所有面都赋予了编号,因此,生成部12按编号顺序将面的边的数量作为项进行数列化。也即是说,如果面为三角形,则为3条边,因此与该面对应的项成为“3”。因此,表示正八面体的各面的数列按编号从“1”到“8”的顺序成为“33333333=3⁸”。在该情况下,由于不存在其他的数列模式,因此正八面体被转换为多面体代码“3⁸”。

[0216] 图22是表示从立方八面体生成多面体代码的过程的一例的图。首先,生成部12对任意的面赋予“1”这一编号。而且,生成部12按顺时针(左手系)对与“1”的面邻接的面依次赋予“2”、“3”、“4”这一编号。接着,生成部12对与“2”的面邻接且还没被赋予编号的面赋予“5”这一编号。然后,生成部12对与被赋予了“4”以下的编号的面邻接的面,从“5”的面起按顺时针(左手系)依次赋予“6”、“7”、“8”、“9”、“10”这一编号。进而,生成部12对与“5”的面邻接且还没被赋予编号的面赋予“11”这一编号。然后,生成部12对与被赋予了“10”以下的编号的面邻接的面,从“11”的面起按顺时针(左手系)依次赋予“12”、“13”这一编号。进而,生成部12对与“11”的面邻接且还没被赋予编号的面赋予“14”这一编号。

[0217] 在图22中,设被赋予编号“1”的面为面₁、~、被赋予编号“14”的面为面₁₄。面₁在图22所示的各立方八面体中是右边里侧的三角形的面。将面₁所具有的3条边按顺时针命名为a、b、c。图44是表示立方八面体的面₁的边a、边b、边c的图。面₂与面₁共享边a,面₃与面₁共享边b,面₄与面₁共享边c。图45是表示立方八面体的面₂的图。在图45中,面₂被涂满了黑色。图46是表示立方八面体的面₆的图。在图46中,面₆被涂满了黑色。图47是表示立方八面体的面₇的图。在图47中,面₇被涂满了黑色。

[0218] 由此,对所有面都赋予了编号,因此,生成部12按编号顺序将面的边的数量作为项进行数列化。也即是说,如果面为三角形,则为3条边,因此与该面对应的项成为“3”。另外,如果面为四边形,则为4条边,因此与该面对应的项成为“4”。因此,表示立方八面体的各面的数列按编号从“1”到“14”的顺序成为“34443333334443=34³3⁶4³3”。在该情况下,由于与其他数列模式相比该数列成为最小的数列,因此立方八面体被转换为多面体代码“34³3⁶4³3”。

[0219] 如果整数A小于整数B,则数列A小于数列B。在上述的立方八面体的例子中,最初选择了三角形的情况下可得到“34443333334443=34³3⁶4³3”的数列,而在选择了四边形的情况下可得到“43333444433334=43⁴4⁴3⁴4”的数列。也即是说一个多面体具有多个数列,因此,需要唯一地确定数列。作为一例,可以选择最小的数列。在该情况下,由于数列43333444433334大于数列34443333334443,因此选择数列34443333334443。

[0220] 以下,使用附图,对基于多个多面体代码生成多个多胞体代码的处理进行具体说明。图23是表示从多面体代码生成多胞体代码的过程的一例的流程图。在此,设为取得部11取得多个多面体各自的形状以及每个形状的个数作为第1信息来进行说明。

[0221] (步骤S301)

[0222] 生成部12取得由取得部11取得的第1信息中的、多个多面体各自的形状以及每个形状的个数。

[0223] (步骤S302)

[0224] 生成部12通过将多个多面体中的每一个转换为多面体代码,准备多个多面体代码。

[0225] (步骤S303)

[0226] 生成部12基于多个多面体代码,生成多个多胞体代码。

[0227] 例如,假设多个多面体由8个正四面体和4个正八面体构成。在该情况下,与正四面体对应的多面体代码“3⁴”由“T=3⁴”表示,与正八面体对应的多面体代码“3⁸”由“0=3⁸”表示。因此,生成部12在步骤S303中,通过将多个多面体代码的数列“0000TTTTTTTT”重新排列,生成多个多胞体代码。例如,多胞体代码为“T0000TTTTTTT=T0⁴T⁷”。也即是说,在步骤S303中,基于多个多面体代码、即8个T和4个0,生成多个多胞体代码。多个多胞体代码各自包含8个T和4个0。“0000TTTTTTTT”和“T0000TTTTTTT”是不同的多胞体代码。

[0228] 以下,使用附图,对将多胞体代码转换为三维结构的处理进行具体说明。在以下说明的处理中,也包括判定多胞体代码能否转换为三维结构的处理。图24是表示从多胞体代码生成三维结构的过程的一例的流程图。

[0229] (步骤S401)

[0230] 生成部12生成与多胞体代码的各项、也即是说多面体代码对应的多面体。

[0231] (步骤S402)

[0232] 生成部12按照多胞体代码的项顺序,对多面体的各面按顺时针赋予编号。例如,在对与多胞体代码的第1项对应的多面体赋予了编号“1”~“4”的情况下,对于与多胞体代码的第2项对应的多面体,从编号“5”起赋予编号。也即是说,生成部12以使在各多面体中编号不重复的方式对各多面体的各面赋予编号。

[0233] (步骤S403)

[0234] 生成部12将具有未结合的最小编号的面的多面体决定为部分多胞体。

[0235] (步骤S404)

[0236] 生成部12选择具有与部分多胞体的最小编号的面的形状相同的形状的剩余的多面体的面。例如,如果部分多胞体的最小编号的面的形状为三角形,则从剩余的多面体选择相同的三角形的面。在此,既有选择一个面的情况,也有选择多个面的情况。

[0237] (步骤S405)

[0238] 生成部12将所选择的面中的最小编号的面与部分多胞体的未结合的最小编号的面结合。

[0239] (步骤S406)

[0240] 生成部12判断在部分多胞体的面与所选择的剩余的多面体的面中是否存在未结合的面的一组。在存在未结合的面的一组的情况下(步骤S406:是),生成部12接着执行步骤S407。在没有未结合的面的一组的情况下(步骤S406:否),生成部12接着执行步骤S408。

[0241] (步骤S407)

[0242] 生成部12将部分多胞体以及所选择的剩余的多面体的未结合的面彼此结合。而且,生成部12回到步骤S406。

[0243] (步骤S408)

[0244] 生成部12判断是否存在未结合的剩余的多面体。在存在未结合的剩余的多面体的情况下(步骤S408:是),生成部12回到步骤S403。在没有未结合的剩余的多面体的情况下

(步骤S408:否),生成部12接着执行步骤S409。

[0245] (步骤S409)

[0246] 生成部12判断所有多面体是否100%填充完成,换言之,判断是否无空隙地配置了所有多面体。在所有多面体100%填充完成的情况下(步骤S409:是),生成部12的处理完成。在该情况下,生成部12将多胞体代码转换成了三维结构。在没能100%填充所有多面体的情况下(步骤S409:否),生成部12接着执行步骤S410。

[0247] (步骤S410)

[0248] 生成部12将填充率不为100%的三维结构废弃,完成处理。在该情况下,生成部12不将多胞体代码转换为三维结构。

[0249] 以下,使用附图,对将多面体代码转换为三维结构的处理的具体例进行说明。图25是表示多胞体代码的具体例的图。图26是表示从多胞体代码生成三维结构的过程的具体例的图。如图25所示,以下,对将多胞体代码“T0000TTTTTT”转换为三维结构的情况进行说明。

[0250] 首先,生成部12将多胞体代码中的多面体代码“T”和“0”分别转换为对应的多面体。在该情况下,多面体代码“T”为正四面体,多面体代码“0”为正八面体。接着,生成部12按照多胞体代码所包含的多个项的顺序,对多面体的各面按顺时针赋予编号。例如,与多胞体代码的第一项(最左边的项)对应的正四面体的各面被赋予“1”~“4”的编号,与第二项对应的正八面体的各面被赋予“5”~“10”的编号。而且,生成部12将与多胞体代码的第一项对应的正四面体决定为部分多胞体。

[0251] 接着,生成部12选择具有作为部分多胞体的正四面体的最小编号的面的形状的、剩余的多面体的面。在此,由于部分多胞体的最小编号的面即“1”的面的形状为三角形、且剩余所有多面体的面的形状为三角形,因此选择剩余所有多面体的面。之后,生成部12将所选择的面中的最小编号的面、和部分多胞体的未结合的最小编号的面结合。在此,作为部分多胞体的正四面体的“1”的面、和与多胞体代码的第二项对应的正八面体的“5”的面被结合。

[0252] 接着,由于在部分多胞体的面、和所选择的剩余的多面体的面中存在未结合的面,因此生成部12反复进行将未结合的面彼此结合的处理。在此,生成部12将部分多胞体的未结合的最小编号即“2”的面、和所选择的剩余的多面体中的未结合的最小编号的“13”的面结合。同样地,生成部12将“3”的面和“21”的面结合,将“4”的面和“29”的面结合。

[0253] 接着,由于存在未结合的剩余的多面体,因此生成部12将剩余的多面体中的具有未结合的最小编号的面的多面体(在此为与多胞体代码的第二项对应的正八面体)决定为新的部分多胞体,并反复进行与上述同样的处理。

[0254] 而且,生成部12通过反复进行上述的处理直至不再有未结合的剩余的多面体,生成填充率为100%的三维结构。也即是说,生成部12将新部分多胞体的未结合的最小编号即“6”的面、和所选择的剩余的多面体中的未结合的最小编号的“37”的面结合。同样地,生成部12将“7”的面和“41”的面结合,将“8”的面和“45”的面结合,将“9”的面和“49”的面结合,将“10”的面和“53”的面结合,将“11”的面和“57”的面结合,将“12”的面和“59”的面结合。在多胞体代码“T000TTTTTT”的情况下,由生成部12生成的三维结构成为fcc型结构。

[0255] 以下,使用附图,对实施方式1涉及的信息处理系统100以及显示部3、第1存储部4、

第2存储部5的动作例进行说明。图27是表示实施方式1涉及的信息处理系统100以及显示部3、第1存储部4、第2存储部5的动作例的时序图。

[0256] (步骤S501)

[0257] 信息处理系统100的取得部11取得第1信息。在此,第1信息通过用户一边查看读出保存于第1存储部4的多面体数据而显示于显示部3的第1图像、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。

[0258] (步骤S502)

[0259] 信息处理系统100的生成部12执行将由取得部11取得的第1信息所包含的各多面体转换为多面体代码的处理。

[0260] (步骤S503)

[0261] 信息处理系统100的生成部12执行基于通过转换而得到的多个多面体代码,生成多个多胞体代码的处理。

[0262] (步骤S504)

[0263] 信息处理系统100的生成部12执行判定所生成的多胞体代码能否转换为三维结构的处理。

[0264] (步骤S505)

[0265] 信息处理系统100的生成部12执行将判定为能够转换的多胞体代码转换为三维结构的处理。

[0266] (步骤S506)

[0267] 显示部3显示表示从信息处理系统100的输出部13输出的第2信息的第2图像。

[0268] (步骤S507)

[0269] 用户查看显示于显示部3的第2图像,并选择了想要保存的三维结构时,信息处理系统100将与所选择的三维结构有关的第2信息提供给第2存储部5。由此,第2存储部5保存与用户所选择的三维结构有关的第2信息。

[0270] 如上所述,在实施方式1中,通过输入多个多面体的信息,能够网罗性地生成组合所输入的多个多面体而成的三维结构(也即是说,三维空间中的空间填充结构)。因此,在实施方式1中,能够使用网罗性地生成的三维结构进行未知材料的探索,因此能够实现未知材料的探索的高效化。

[0271] 顺便说一下,在实施方式1涉及的信息处理系统100(信息处理方法)中,将多面体转换为多面体代码,从转换出的多面体代码生成多胞体代码,并将生成的多胞体代码转换为三维结构,但不限于此。实施方式1涉及的信息处理系统100也可以将多面体转换为多面体图,从转换出的多面体图生成周期图,并将生成的周期图转换为三维结构。即,生成部12(生成第2信息的步骤)也可以执行将所取得的第1信息转换为分别表示多个多面体的多个多面体图的处理、和将使用转换出的多个多面体图生成的周期图转换为三维结构的处理。

[0272] 以下,对实施方式1涉及的信息处理系统100的上述动作(也即是说信息处理方法)进行说明。图28是表示实施方式1涉及的信息处理系统100的另一动作例的流程图。

[0273] (步骤S108)

[0274] 取得部11取得第1信息。如上所述,第1信息通过用户一边查看读出保存于第1存储部4的多面体数据而显示于显示部3的第1图像、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得

部11取得。此外,第1信息也可以通过用户不参照第1图像而使用输入部2输入原始数据来由取得部11取得。

[0275] (步骤S109)

[0276] 生成部12基于取得的第1信息,判定各多面体的顶点的位置(顶点位点)和各多面体的中心的位置(中心位点)。

[0277] (步骤S110)

[0278] 生成部12执行将由取得部11取得的第1信息转换为分别表示多个多面体的多个多面体图的处理。在此,生成部12将第1信息所包含的各多面体转换为多面体图。

[0279] (步骤S111)

[0280] 生成部12执行使用转换出的多面体图生成周期图的处理。在此,生成部12基于通过转换而得到的多个多面体图的组合,生成多个周期图。

[0281] (步骤S112)

[0282] 生成部12判定所生成的周期图能否转换为三维结构。生成部12例如能够根据彼此相接的2个多面体的面是否相同、多个多面体是否被无空隙地进行了配置(换言之,填充率是否为100%),判定周期图能否向三维结构转换。在判定为能够转换的情况下(步骤S112:是),生成部12接着执行步骤S113。在判定为不能转换的情况下(步骤S112:否),生成部12接着执行步骤S114。

[0283] (步骤S113)

[0284] 生成部12执行将周期图转换为三维结构的处理。在转换处理中,例如可以使用上述的小谷/砂田理论(Kotani-Sunada,2000,Trans.Amer.Mat)所示的方法。生成部12接着执行步骤S114。

[0285] (步骤S114)

[0286] 生成部12判断是否存在尚未判定能否转换的周期图。在存在尚未判定的周期图的情况下(S114:是),生成部12回到步骤S112。在对所有周期图进行了判定的情况下(S114:否),生成部12的处理完成。然后,信息处理系统100(信息处理方法)接着执行步骤S115。

[0287] (步骤S115)

[0288] 输出部13执行将由生成部12生成的第2信息输出的处理。在此,输出部13通过使显示部3显示表示由生成部12生成的第2信息的第2图像,输出第2信息。

[0289] 显示部3也可以包括显示控制部30。也可以将包括显示控制部30的显示部3称为显示部3A。输出部13也可以将生成部12生成的第2信息输出到显示部3A。由此,显示部3A也可以显示第2信息。也即是说,输出部13也可以使显示部3A显示第2信息。

[0290] 以下,使用附图,对从多面体生成三维结构的处理的具体例进行说明。图29是表示将多面体转换为多面体图的过程的具体例的图。图30是表示将周期图转换为三维结构的情况的具体例的图。

[0291] 首先,生成部12判定多面体的各顶点位点和多面体的中心位点。在图29的(a)所示的正四面体的情况下,如图29的(b)所示,生成部12判定4个顶点位点以及1个中心位点。另外,在图29的(d)所示的正八面体的情况下,如图29的(e)所示,生成部12判定6个顶点位点以及1个中心位点。

[0292] 接着,生成部12通过将多面体的各顶点位点与中心位点相连,生成多面体图。在多

面体为正四面体的情况下,如图29的(c)所示,生成部12生成边从中心节点延伸到4个顶点节点中的每一个的多面体图。另外,在多面体为正八面体的情况下,如图29的(f)所示,生成部12生成边从中心节点延伸到6个顶点节点中的每一个的多面体图。

[0293] 接着,生成部12通过将所生成的多面体图中的各顶点节点结合,生成周期图。图30的(a)所示的周期图表示从与2个正四面体对应的2个多面体图、和与1个正八面体对应的1个多面体图生成的周期图。该周期图通过各多面体图的顶点节点结合为一个节点而生成。而且,生成部12将生成的周期图转换为三维结构。图30的(b)所示的三维结构(fcc型结构)通过转换图30的(a)所示的周期图而生成。

[0294] (实施方式2)

[0295] 以下,使用附图,对本公开的实施方式2涉及的信息处理系统200(信息处理方法或者程序)进行详细说明。实施方式2涉及的信息处理系统200与实施方式1涉及的信息处理系统100的不同之处在于,取得部11取得与材料的组成有关的信息作为第1信息。此外,实施方式2涉及的信息处理系统200与实施方式1涉及的信息处理系统100同样,具备取得部11、生成部12以及输出部13,由于构成是共同的,因此省略它们的说明。

[0296] [使用例]

[0297] 以下,列举实施方式2涉及的信息处理系统200的使用例。以下,在第2使用例的说明中,省略关于与第1使用例共同之处的说明。

[0298] 图31、图32以及图33均是表示在实施方式2的第1使用例中显示于显示部3的图像的图。图31的(a)以及图31的(b)均表示了最初显示于显示部3的第1图像的一例。显示部3既可以显示图31的(a)所示的第1图像,也可以显示图31的(b)所示的第1图像。

[0299] 图31的(a)所示的第1图像包含用于选择元素的元素选择区域、和“下一步”这一执行图标。在元素选择区域,显示出元素周期表。用户在元素选择区域中选择所期望的材料中含有的元素(原子)。在此,例如在用户对同一元素进行了一次选择操作的情况下,该元素成为配置在多面体的中心的元素。另一方面,在用户对同一元素进行了两次选择操作的情况下,该元素成为配置在多面体的顶点的元素。而且,当用户选择了执行图标时,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得与材料的组成(在此为材料所含有的原子)有关的信息作为第1信息。

[0300] 图31的(b)所示的第1图像包含用于指定材料的组成的组成指定区域、和“下一步”这一执行图标。在组成指定区域,显示出用于用户指定所期望的材料的组成的文本框。用户在文本框中输入所期望的材料的组成式。而且,当用户选择了执行图标时,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得与材料的组成(在此为材料的组成本身)有关的信息作为第1信息。此外,在图31的(b)所示的组成式中,省略了下标的表现。

[0301] 图32表示了第二个显示于显示部3的第1图像的一例。当在图31的(a)所示的第1图像、或者图31的(b)所示的第1图像中,用户选择了执行图标的情况下,图32所示的第1图像被显示于显示部3。图32所示的第1图像显示有用于指定材料所包含的元素(原子)的配置的配置指定区域、和“下一步”这一执行图标。在配置指定区域,显示表示多面体中的各元素的数量、和各元素在多面体中的位置(顶点或者中心)的表。

[0302] 在此,在经过图31的(a)所示的第1图像,图32所示的第1图像显示于显示部3的情况下,在配置指定区域中,各元素的位置已经被指定。因此,用户指定多面体中的各元素的

数量,选择执行图标。在该情况下,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得与元素(原子)在三维结构中的配置有关的配置信息作为第1信息。

[0303] 另一方面,在经过图31的(b)所示的第1图像,图32所示的第1图像显示于显示部3的情况下,在配置指定区域中,各元素的数量已经被指定。因此,用户指定多面体中的各元素的配置,选择执行图标。在该情况下,取得部11(在取得第1信息的步骤中)也会取得与元素(原子)在三维结构中的配置有关的配置信息作为第1信息。

[0304] 图33表示了第三个显示于显示部3的第1图像的一例。当在图32所示的第1图像中,用户选择了执行图标的情况下,图33所示的第1图像被显示于显示部3。图33所示的第1图像包含用于选择多面体的组合的组合选择区域、变形度指定区域、和“生成三维结构”这一执行图标。此外,图33所示的第1图像也可以例如包含单位结构选择区域以代替变形度指定区域。也即是说,在图33所示的第1图像中,也可以,除了组合选择区域之外,应用实施方式1的第1使用例~第5使用例中的任一个或者它们的组合。

[0305] 在组合选择区域,显示出基于配置信息的用户可选择的多个多面体的组合、和与多个多面体的组合分别对应的多个选择用按钮。此外,在组合选择区域中,也可以显示出各多面体的形状的名称。另外,在组合选择区域中,各多面体也可以通过动态图像而不是静态图像来显示。用户在组合选择区域中选择希望包含于三维结构的多面体的组合。由此,取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得表示多个多面体各自的形状的形状信息、和表示每个形状的构成比的构成比信息作为第1信息。

[0306] 而且,当用户选择了执行图标时,执行下述处理。

[0307] 生成部12基于构成比信息,决定表示多个多面体的每个形状的数量个数信息。该个数信息也可以是多个个数信息。例如,设为在图33中选择了表示正四面体的数量:正八面体的数量=2:1的信息。多个个数信息也可以是表示(正四面体数为2个、正八面体数为1个)、(正四面体数为4个、正八面体数为2个)、…、(正四面体数为 $2 \times n$ 个、正八面体数为 $1 \times n$ 个)的信息。 n 可以为2以上的自然数、且为预定值。也可以对多个个数信息中的每一个,执行下述处理。

[0308] 生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与使形状信息所表示的形状的多个多面体中的每个多面体按与该多面体对应的数量无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。换言之,生成部12生成与使形状信息所表示的形状的多个多面体按构成比信息所表示的每个形状的构成比无空隙地进行配置而得到的三维结构有关的第2信息。在此,上述的形状信息以及构成比信息是基于配置信息的信息。因此,可以说生成部12(在生成第2信息的步骤中)是基于配置信息所表示的元素(原子)的配置生成与三维结构有关的第2信息。

[0309] 之后,与实施方式1的第1使用例同样地,在显示部3显示第2图像。而且,通过用户选择想要保存的三维结构以及三维结构的保存形式,与用户所选择的三维结构有关的第2信息被保存于第2存储部5。

[0310] 以下,使用附图,对实施方式2涉及的信息处理系统200以及显示部3、第1存储部4、第2存储部5的第1动作例进行说明。图34是表示实施方式2涉及的信息处理系统200以及显示部3、第1存储部4、第2存储部5的第1动作例的时序图。

[0311] (步骤S601)

[0312] 信息处理系统200的取得部11取得材料信息以及配置信息。在此,材料信息通过用

户一边查看最初显示于显示部3的第1图像(参照图31)、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。另外,配置信息通过用户一边查看第二个显示于显示部3的第1图像(参照图32)、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。

[0313] (步骤S602)

[0314] 信息处理系统200的取得部11搜索基于配置信息的用户可选择的多个多面体的组合。在搜索多个多面体的组合时,取得部11读出并参照保存于第1存储部4的多面体数据。

[0315] (步骤S603)

[0316] 显示部3显示从信息处理系统200的输出部13输出的多个多面体的组合。换言之,显示部3显示包含用于选择多面体的组合的组合选择区域的第1图像。

[0317] (步骤S604)

[0318] 信息处理系统200的取得部11取得第1信息。在此,第1信息是形状信息以及构成比信息,通过用户一边查看第三个显示于显示部3的第1图像(参照图33)、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。

[0319] (步骤S605)

[0320] 信息处理系统200的生成部12执行将判定为能够转换的多胞体代码转换为三维结构的处理。此外,步骤S605是与步骤S505(参照图27)相同的处理。另外,在步骤S604与步骤S605之间,执行与步骤S502~步骤S504(参照图27)相同的处理。

[0321] (步骤S606)

[0322] 显示部3显示表示从信息处理系统200的输出部13输出的第2信息的第2图像。

[0323] (步骤S607)

[0324] 用户查看显示于显示部3的第2图像,并选择了想要保存的三维结构时,信息处理系统200将与所选择的三维结构有关的第2信息提供给第2存储部5。由此,第2存储部5保存与用户所选择的三维结构有关的第2信息。

[0325] 图35以及图36均是表示在实施方式2的第2使用例中显示于显示部3的图像的图。图35表示了第二个显示于显示部3的第1图像的一例。在第2使用例中,图35所示的第1图像代替图32所示的第1图像显示于显示部3。图35所示的第1图像与图32所示的第1图像不同,包含用于进行多面体信息的输入的“是”这一第1执行图标、和用于不进行多面体信息的输入的“否”这一第2执行图标,以代替“下一步”这一执行图标。

[0326] 当在图35所示的第1图像中,用户选择了第1执行图标的情况下,例如实施方式1的第1使用例~第5使用例中的任一个或者将它们组合的、促使输入多面体信息的第1图像(参照图8的(a)、图11、图13、图14以及图15的(a))显示于显示部3。因此,通过用户一边查看显示于显示部3的第1图像、一边对多面体信息进行输入(选择),取得部11(在取得第1信息的步骤中)将会取得多面体信息(第1信息)。而且,通过用户选择执行图标,生成部12(在生成第2信息的步骤中)生成与作为三维结构的材料的组成可取的晶体结构有关的第2信息。在该情况下,生成部12不仅基于材料信息以及配置信息,还基于多面体信息,生成第2信息。

[0327] 另一方面,当在图35所示的第1图像中,用户选择了第2执行图标的情况下,生成部12(在生成第2信息的步骤中)也生成与作为三维结构的材料的组成可取的晶体结构有关的第2信息。在该情况下,生成部12基于材料信息以及配置信息,生成第2信息。

[0328] 图36表示了显示于显示部3的第2图像的一例。第2图像在生成部12生成与三维结

构(在此为晶体结构)有关的第2信息之后显示于显示部3。第2图像包含由生成部12生成的晶体结构的一览、和“导出所选择的晶体结构”这一执行图标。

[0329] 用户选择想要保存的晶体结构,并选择执行图标。之后,与实施方式1同样,通过用户选择所期望的保存形式,与用户所选择的晶体结构有关的第2信息被保存于第2存储部5。

[0330] 以下,使用附图,对实施方式2涉及的包括信息处理系统200的整体的第2动作例进行说明。图37是表示实施方式2涉及的信息处理系统200以及显示部3、第1存储部4、第2存储部5的第2动作例的时序图。在此,设为用户输入多面体信息来进行说明。

[0331] (步骤S701)

[0332] 信息处理系统200的取得部11取得材料信息以及配置信息。在此,材料信息通过用户一边查看最初显示于显示部3的第1图像(参照图31)、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。另外,配置信息通过用户一边查看第二个显示于显示部3的第1图像(参照图32)、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。

[0333] (步骤S702)

[0334] 信息处理系统200的取得部11取得第1信息。在此,第1信息是多面体信息,通过用户一边查看显示于显示部3的第1图像、一边使用输入部2进行输入(选择)而由取得部11取得。

[0335] (步骤S703)

[0336] 信息处理系统200的生成部12执行将判定为能够转换的多胞体代码转换为三维结构的处理。此外,步骤S703是与步骤S505(参照图27)相同的处理。另外,在步骤S702与步骤S703之间,执行与步骤S502~步骤S504(参照图27)相同的处理。

[0337] (步骤S704)

[0338] 信息处理系统200的生成部12对生成的每个三维结构生成多个配置模式候选。配置模式候选是在三维结构所包含的各多面体的各顶点以及中心配置的元素(原子)的模式候选。此外,配置模式候选也可能包含不在多面体的中心配置元素这一模式。

[0339] (步骤S705)

[0340] 信息处理系统200的生成部12按各配置模式候选生成晶体结构。具体而言,生成部12通过按照配置模式候选在各多面体的各顶点以及中心配置元素(原子),生成晶体结构。

[0341] (步骤S706)

[0342] 显示部3显示表示从信息处理系统200的输出部13输出的与晶体结构有关的第2信息的第2图像。

[0343] (步骤S707)

[0344] 用户查看显示于显示部3的第2图像,并选择了想要保存的晶体结构时,信息处理系统200将与所选择的晶体结构有关的第2信息提供给第2存储部5。由此,第2存储部5保存与用户所选择的晶体结构有关的第2信息。

[0345] 如上所述,在实施方式2中,通过输入与材料的组成有关的信息,能够网罗性地生成基于所输入的材料信息的组合多个多面体而成的三维结构(也即是说,三维空间中的空间填充结构)。因此,在实施方式2中,能够生成关于用户想要探索的材料三维结构。

[0346] (变形例)

[0347] 以上,基于各实施方式对本公开的一个或多个技术方案涉及的信息处理系统(信

息处理方法)进行了说明,但本公开不限于这些实施方式。只要不脱离本公开的主旨,对上述各实施方式实施本领域技术人员能想到的各种变形而得到的方式也可以包含于本公开。另外,将多个互不相同的实施方式中的构成要素组合而构建的方式也可以包含于本公开。

[0348] 例如,在上述各实施方式中,第2信息是表示三维结构本身的信息,但不限于此。例如,第2信息只要包含表示三维结构的信息、表示表现三维结构的数列(例如,多胞体代码)的信息、以及表示表现三维结构的周期图的信息中的至少一个即可。

[0349] 例如,在上述各实施方式中,信息处理系统100、200使显示部3显示第1图像或者第2图像,但不限于此。例如,信息处理系统100、200也可以不使显示部3显示第1图像或者第2图像本身,而输出这些图像所包含的信息。

[0350] 另外,在上述各实施方式中,信息处理系统100、200的取得部11取得用户在输入部2输入的第1信息,但不限于此。例如,取得部11也可以不接受用户的输入,而将存储于第1存储部4的信息读出而取得第1信息。

[0351] 另外,在上述各实施方式中,第1存储部4和第2存储部5由互不相同的记录介质实现,但不限于此。例如,第1存储部4和第2存储部5也可以由同一记录介质实现。

[0352] 另外,在上述各实施方式中,信息处理系统100、200分别由取得部11、生成部12以及输出部13构成,但不限于此。例如,信息处理系统100也可以如图5的“100A”所示那样包括显示控制部30以及显示部3。信息处理系统200也同样可以包括显示控制部30以及显示部3。

[0353] 此外,在上述各实施方式中,各构成要素也可以由专用硬件构成,或通过执行适合于各构成要素的软件程序来实现。各构成要素也可以通过CPU(Central Processing Unit)或者处理器等程序执行部读取记录于硬盘或者半导体存储器等记录介质的软件程序并执行来实现。

[0354] 此外,如下这样的情况也包含于本公开。

[0355] (1) 上述的至少一个装置具体而言是包括微处理器、ROM(Read Only Memory)、RAM(Random Access Memory)、硬盘单元、显示器单元、键盘、鼠标等的计算机系统。在该RAM或者硬盘单元存储有计算机程序。通过微处理器按照计算机程序工作,上述的至少一个装置实现其功能。在此计算机程序是为了实现预定的功能而组合多条表示对计算机的指令的命令码而构成的。

[0356] (2) 构成上述的至少一个装置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制造而成的超多功能LSI,具体而言,是包括微处理器、ROM、RAM等而构成的计算机系统。上述RAM中存储有计算机程序。通过微处理器按照计算机程序工作,系统LSI实现其功能。

[0357] (3) 构成上述的至少一个装置的构成要素的一部分或全部也可以由能够装卸于该装置的IC卡或者单体模块构成。IC卡或者模块是由微处理器、ROM、RAM等构成的计算机系统。IC卡或者模块也可以包括上述的超多功能LSI。通过微处理器按照计算机程序工作,IC卡或者模块实现其功能。该IC卡或者该模块也可以具有防篡改性能。

[0358] (4) 本公开也可以是上述所示的方法。另外,也可以是通过计算机实现这些方法的计算机程序,还可以是由计算机程序形成的数字信号。

[0359] 另外,本公开也可以将计算机程序或者数字信号记录于计算机可读取的记录介质例如软盘、硬盘、CD (Compact Disc) -ROM、DVD、DVD-ROM、DVD-RAM、BD (Blu-ray (注册商标) Disc)、半导体存储器等。另外,也可以是记录于这些记录介质的数字信号。

[0360] 另外,本公开也可以将计算机程序或者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。

[0361] 另外,也可以通过将程序或数字信号记录在记录介质中移送、或者通过经由网络等将程序或数字信号进行移送,由此通过独立的其他的计算机系统来实施。

[0362] (其他)

[0363] 本公开的实施方式的变形例也可以是如下述所示的方法。

[0364] 一种由执行记录于一个或多个存储器的多个命令的一个或多个处理器执行的方法,包括:

[0365] 接收包含第1多面体的形状的第1信息、~、第n多面体的形状的第n信息的形状信息,所述n为1以上的整数;

[0366] 接收包含与所述第1多面体对应的第1数量、~、与所述第n多面体对应的第n数量的数量信息,由此,决定与所述第1多面体及所述第1数量对应的一个或多个第1多面体、~、与所述第n多面体及所述第n数量对应的一个或多个第n多面体;

[0367] 将包含一个或多个第1代码、~、一个或多个第n代码的多个代码重新排列,由此,决定多个多胞体代码(例如参照图23),所述一个或多个第1代码与对于所述第1数量和所述第1多面体的第1代码对应、~、所述一个或多个第n代码与对于所述第n数量和所述第n多面体的第n代码对应,所述第1代码基于所述第1多面体所包含的多个面各自的多条边的数量而决定、~、所述第n代码基于所述第n多面体所包含的多个面各自的多条边的数量而决定(例如参照图20、图21、图22);

[0368] 基于所述多个多胞体代码,决定包含所述一个或多个第1多面体、~、所述一个或多个第n多面体的三维结构(例如参照图24);

[0369] 生成包含所述三维结构的图像及所述三维结构所包含的多个三维坐标的第2信息;和

[0370] 输出所述图像及所述第2信息,

[0371] 所述三维结构不包含除所述一个或多个第1多面体、~、所述一个或多个第n多面体以外的一个或多个多面体,

[0372] 从所述一个或多个第1多面体、~、所述一个或多个第n多面体中任意选择的2个多面体不重叠,

[0373] 所述三维结构所包含的多个位置与晶体结构所包含的多个原子的多个位置对应。

[0374] 产业上的可利用性

[0375] 本公开在探索未知材料的情况下是有用的。

[0376] 标号说明

[0377] 11取得部;12生成部;13输出部;2输入部;3显示部;30显示控制部;4第1存储部;5第2存储部;100、200信息处理系统;100A信息处理系统。

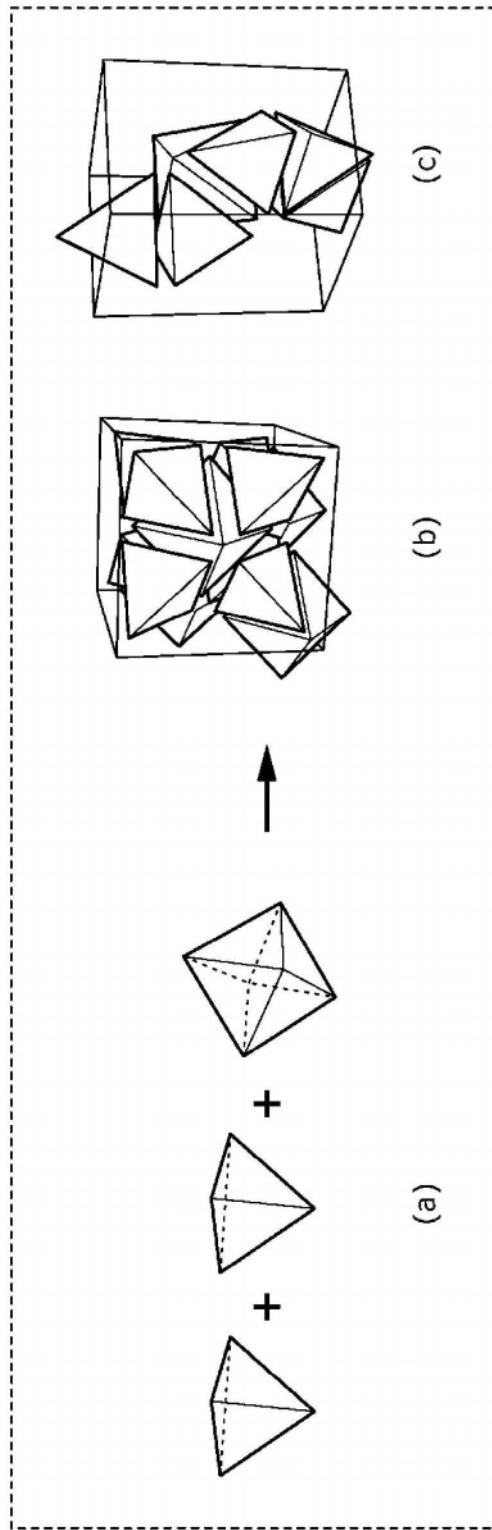


图1

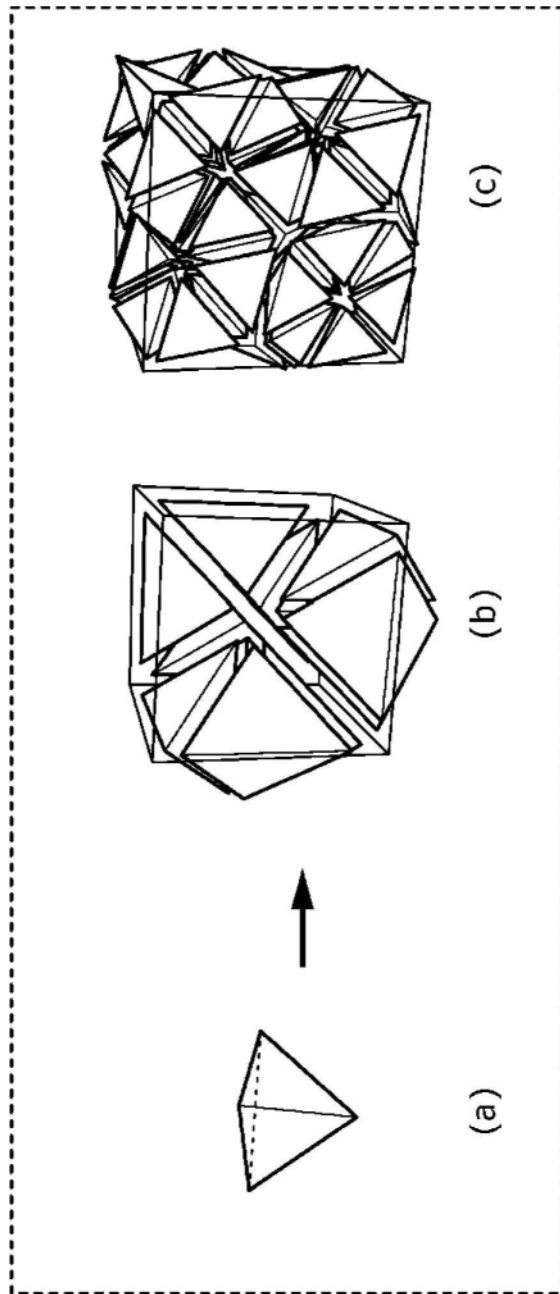


图2

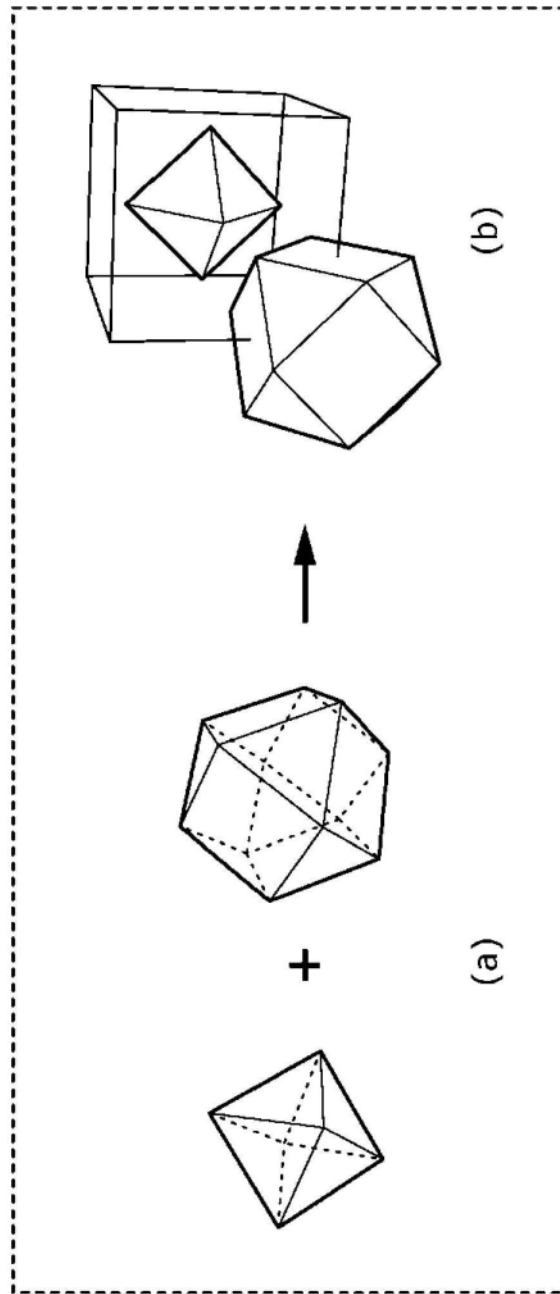


图3

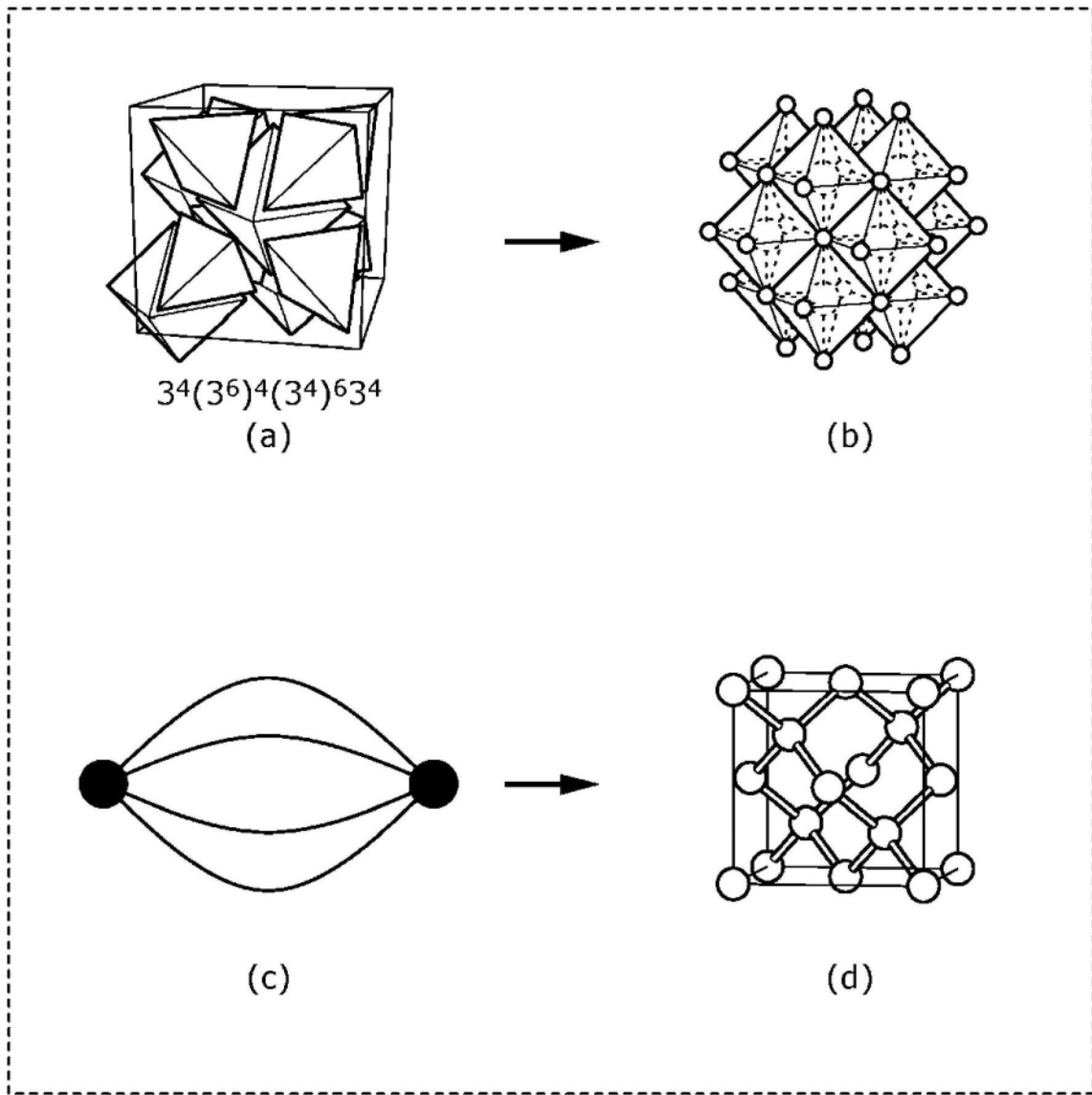


图4

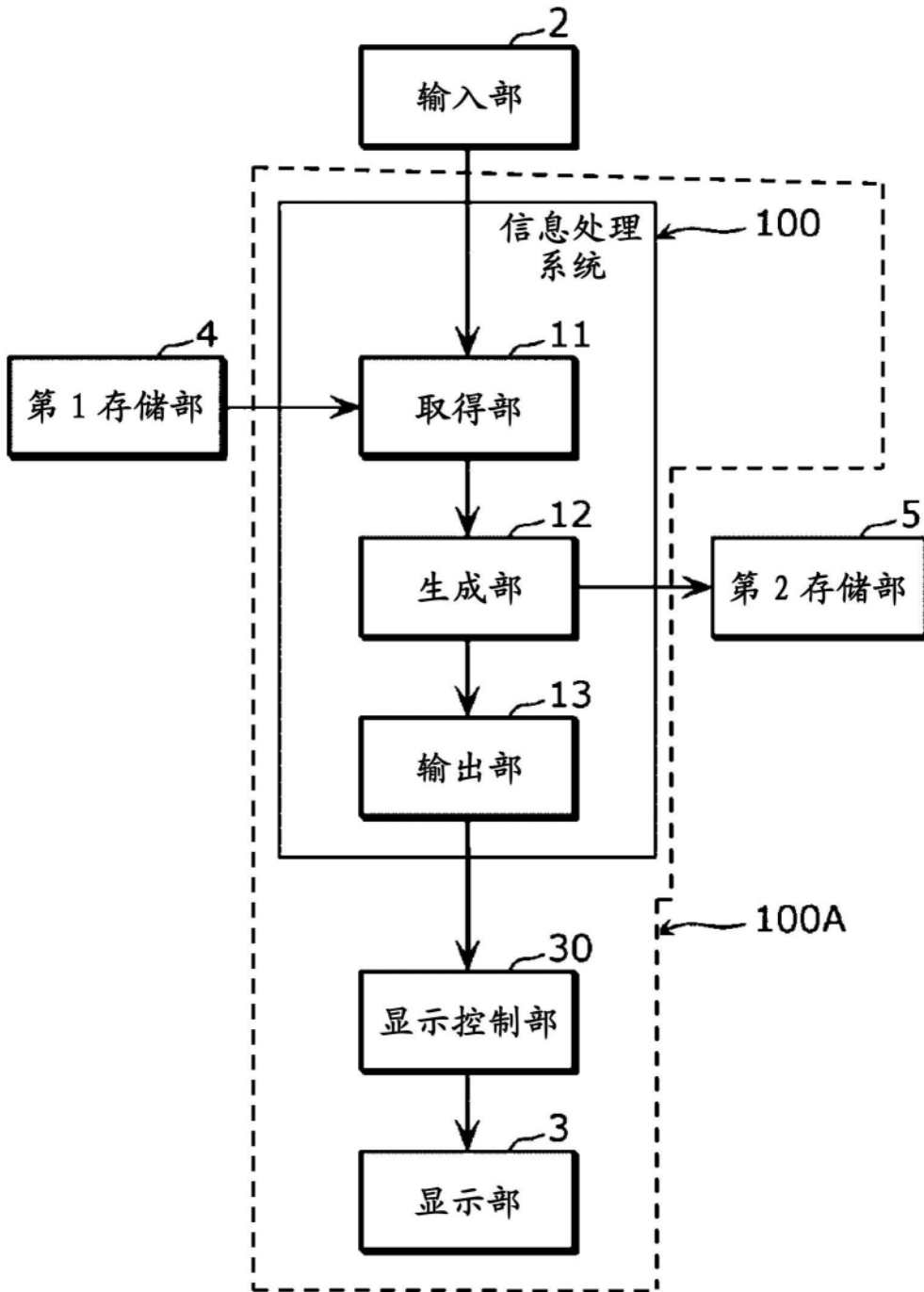


图5

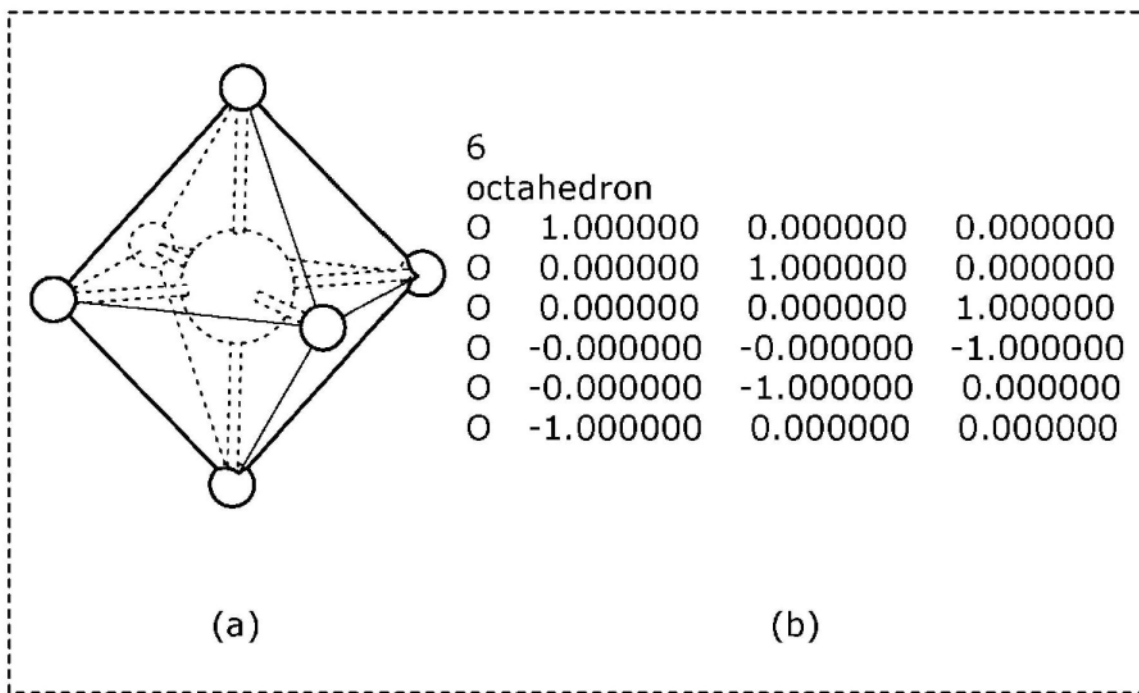


图6

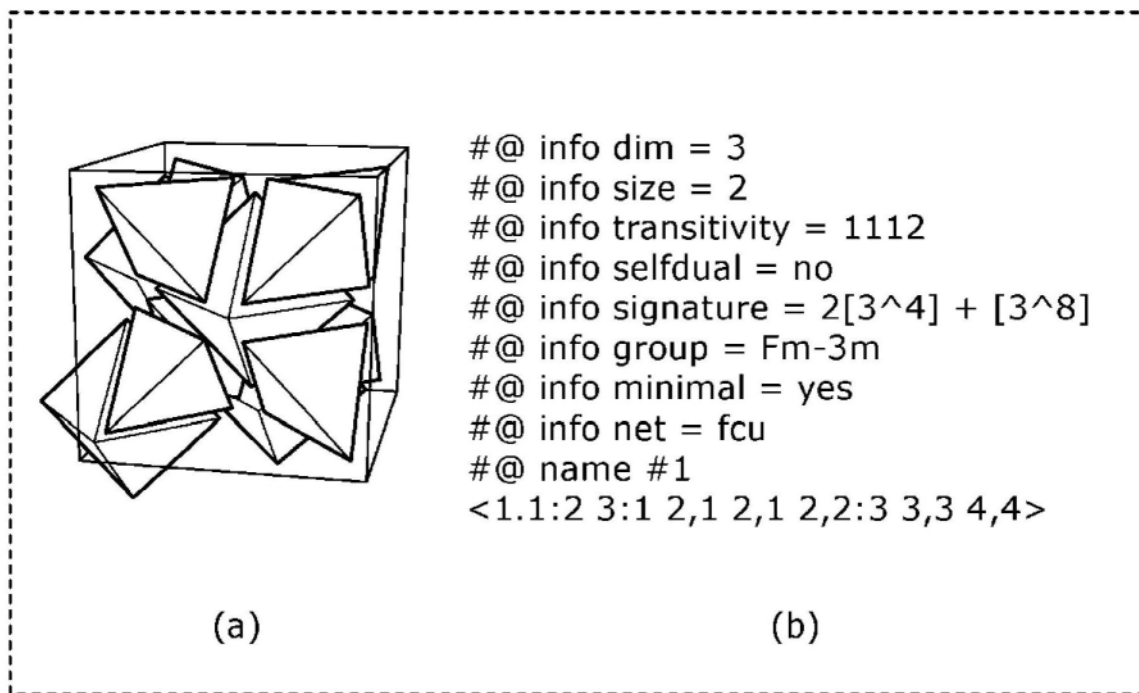


图7

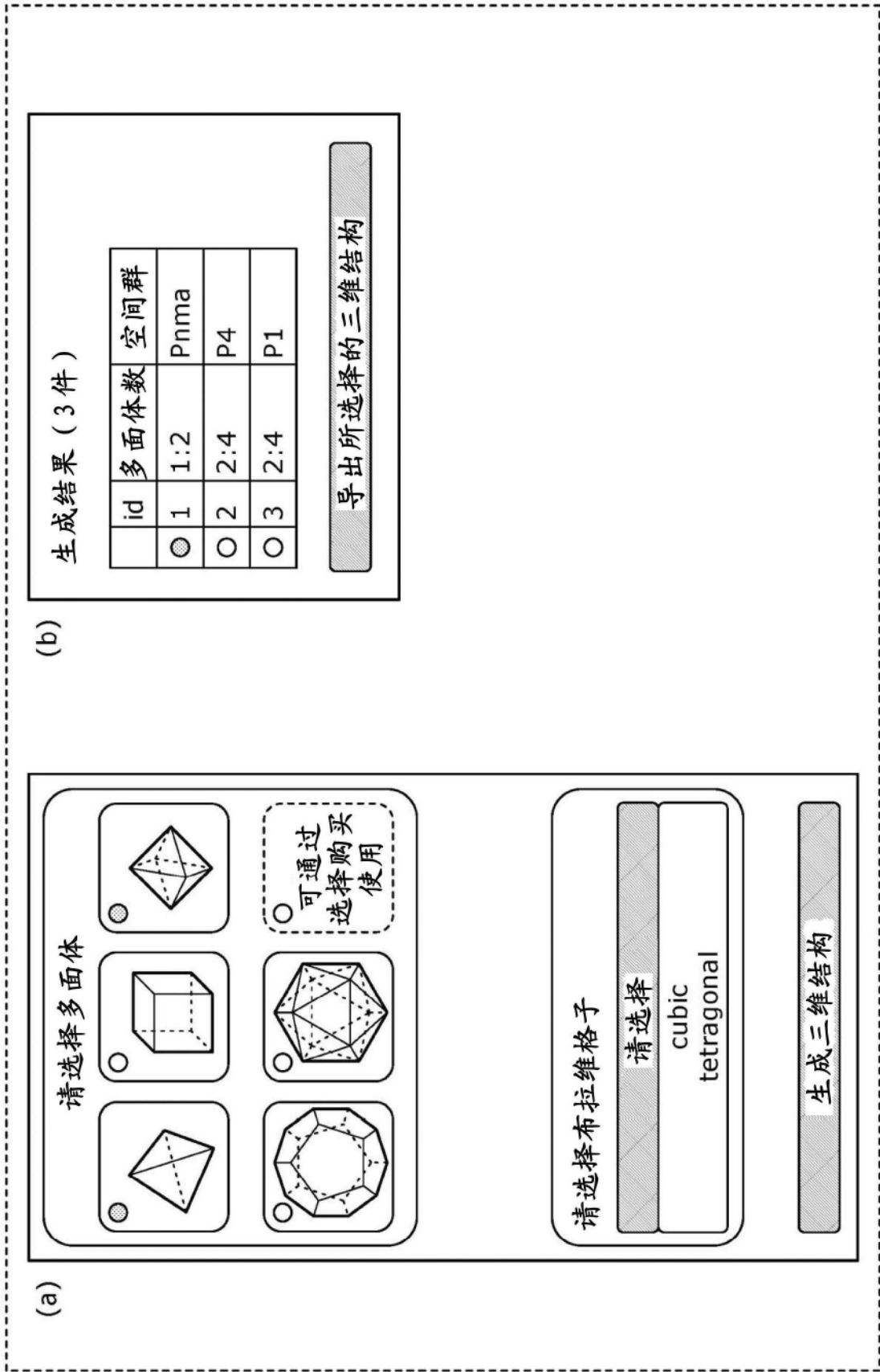


图8

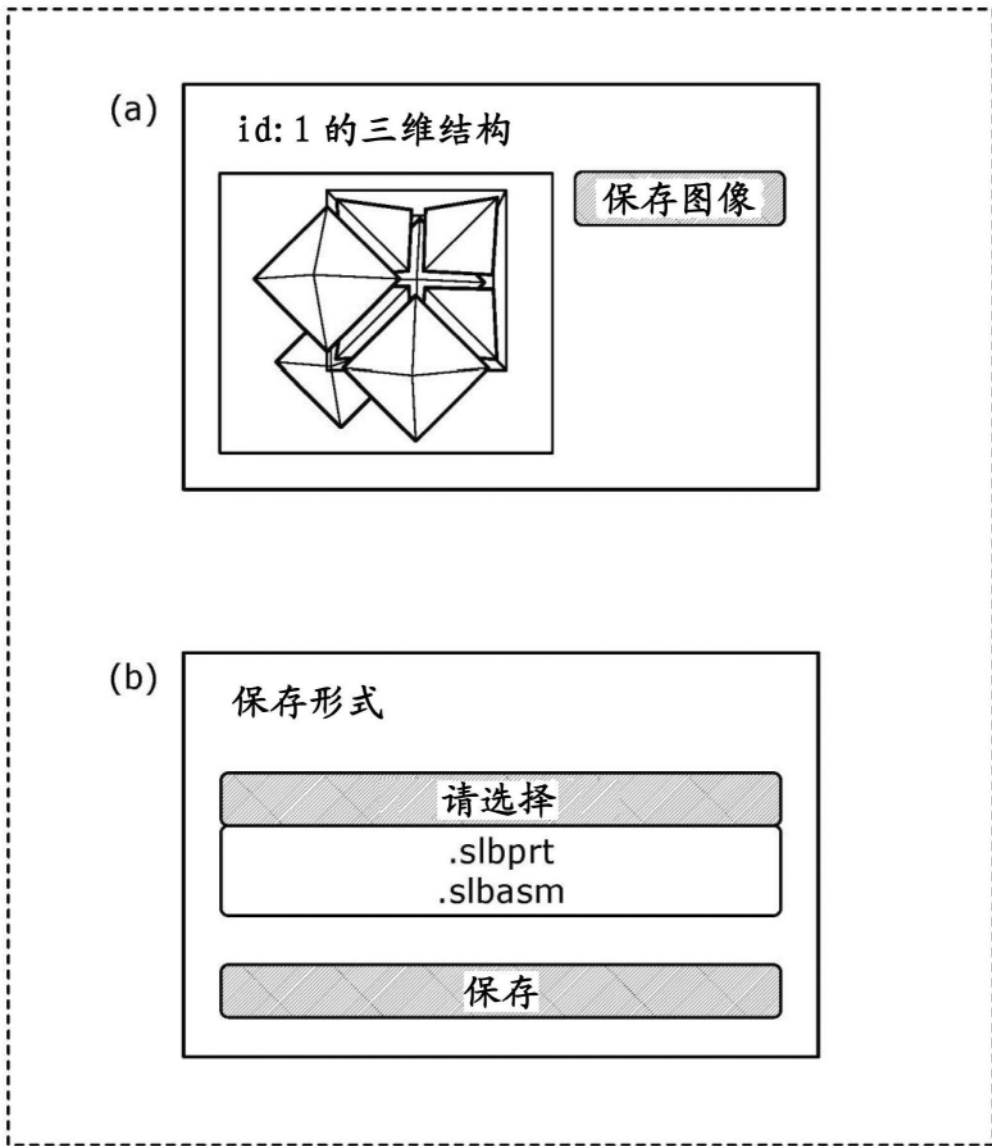


图9

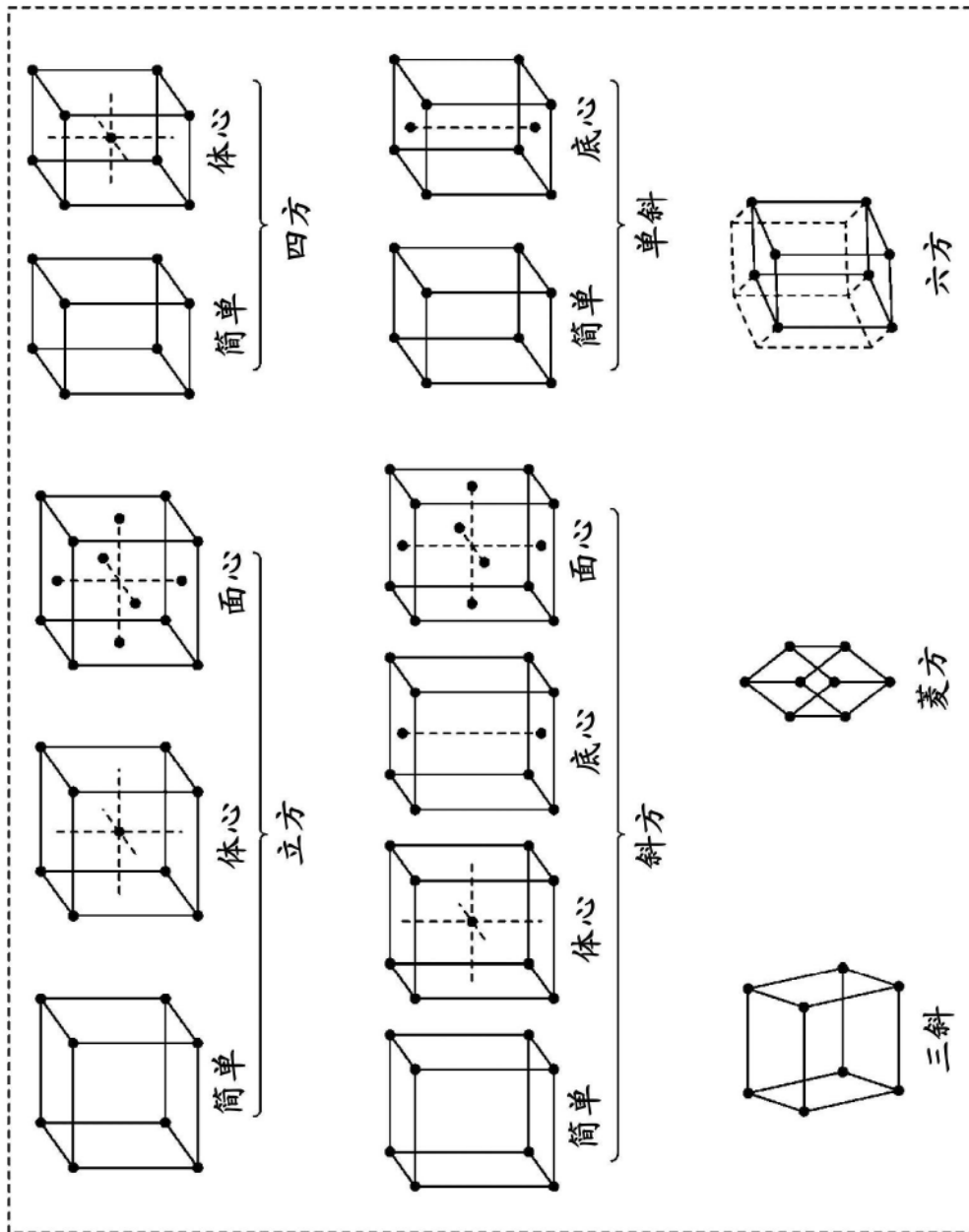


图10

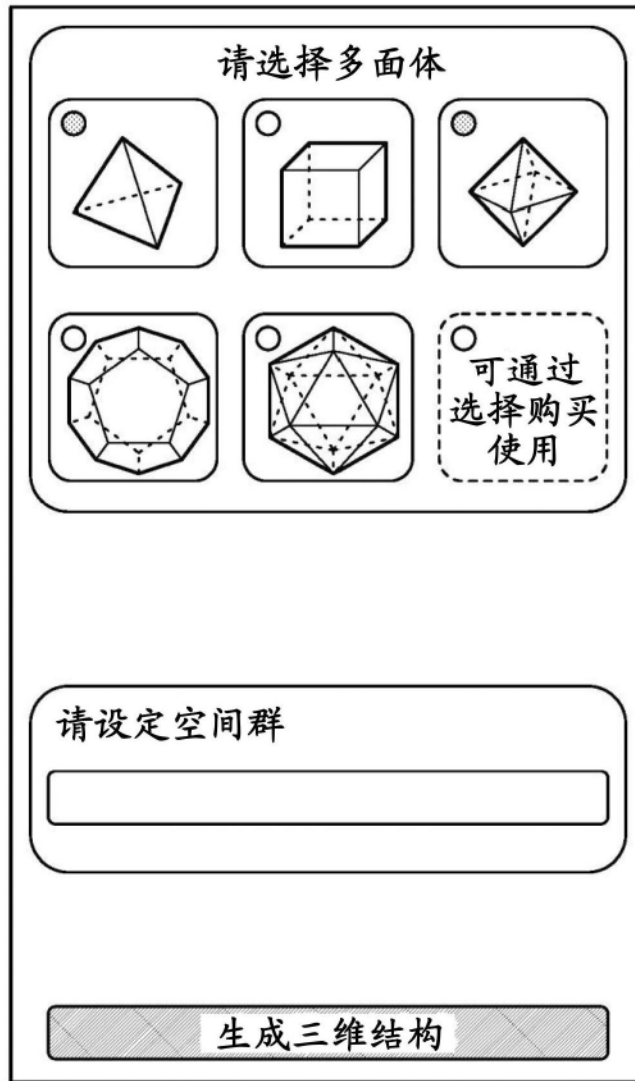


图11

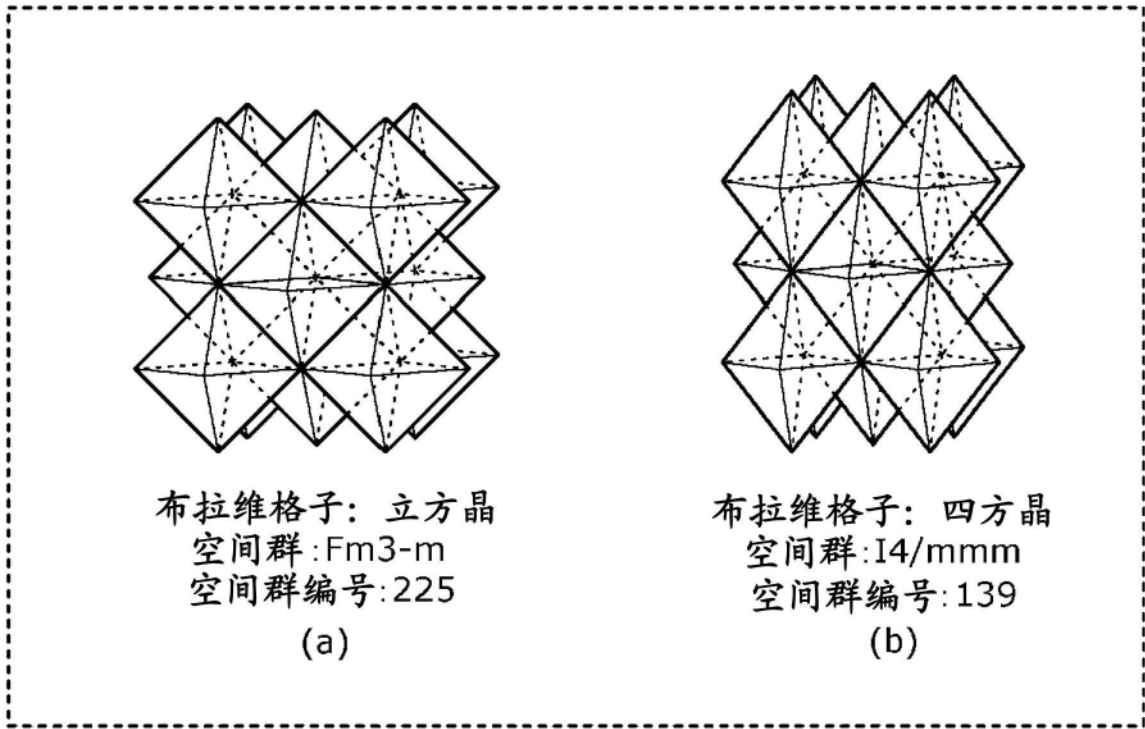


图12

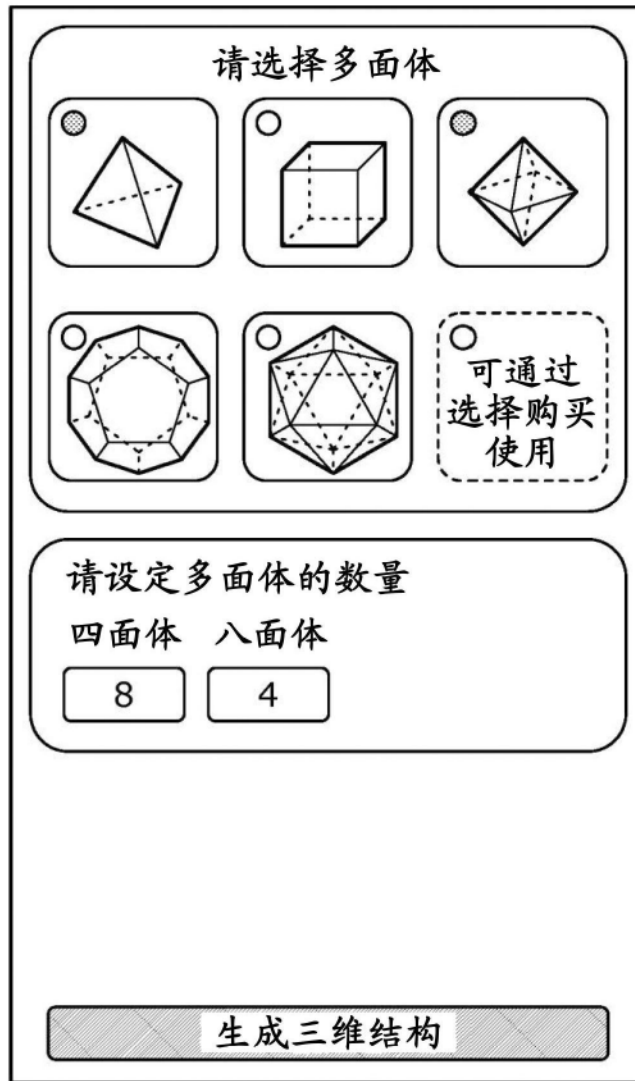


图13

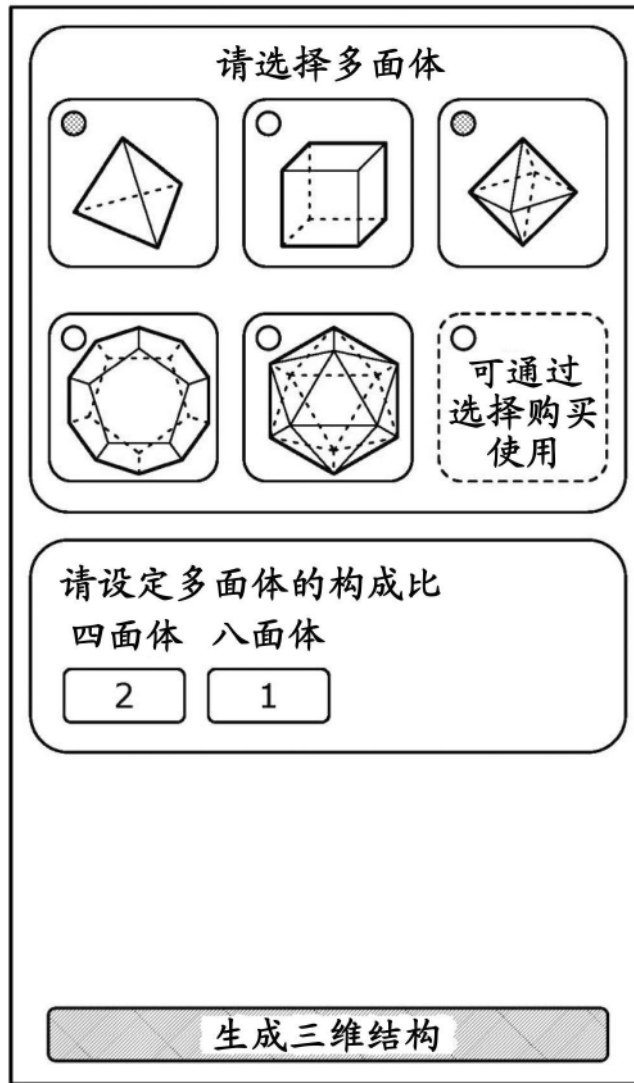


图14

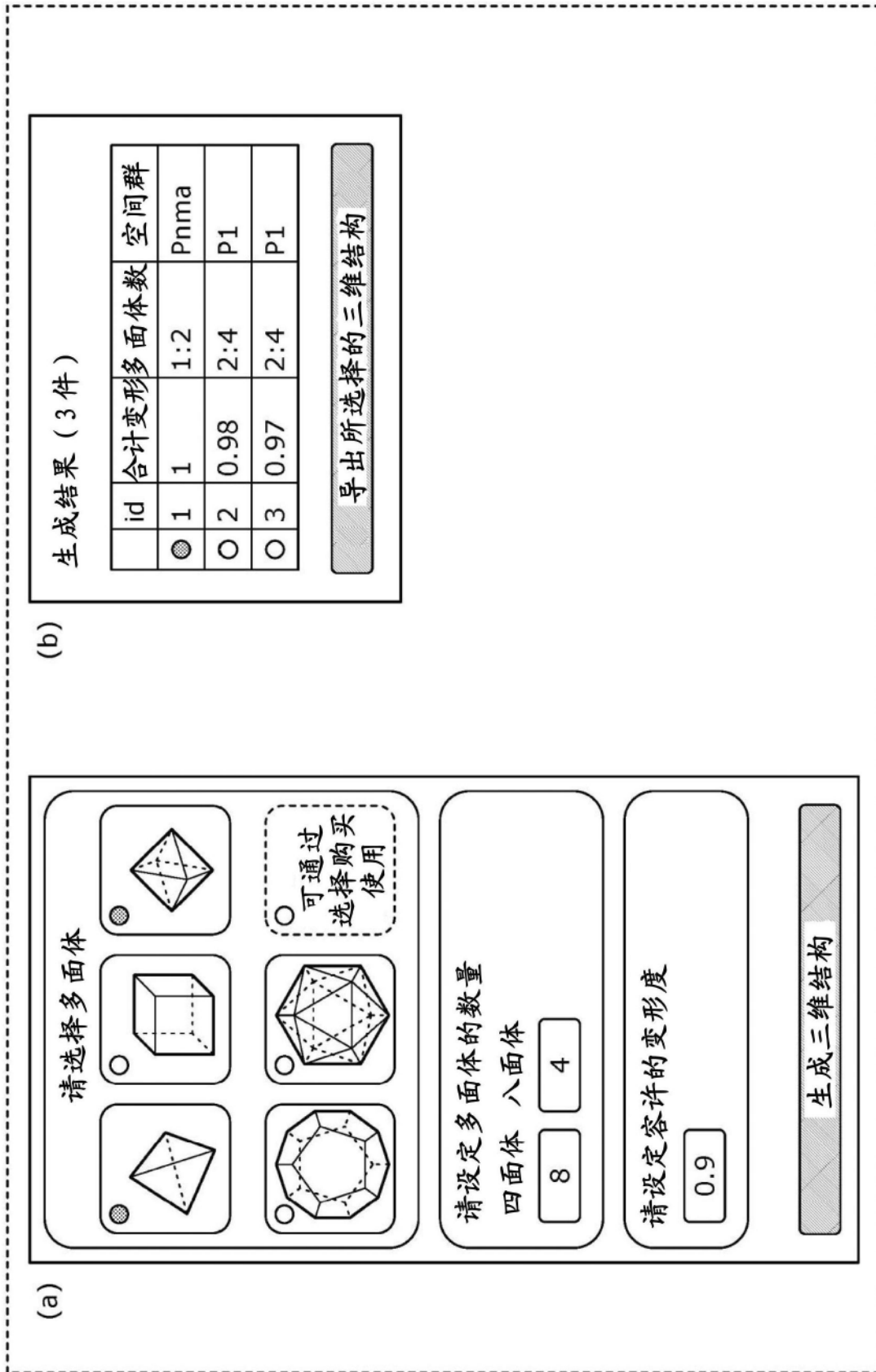


图15

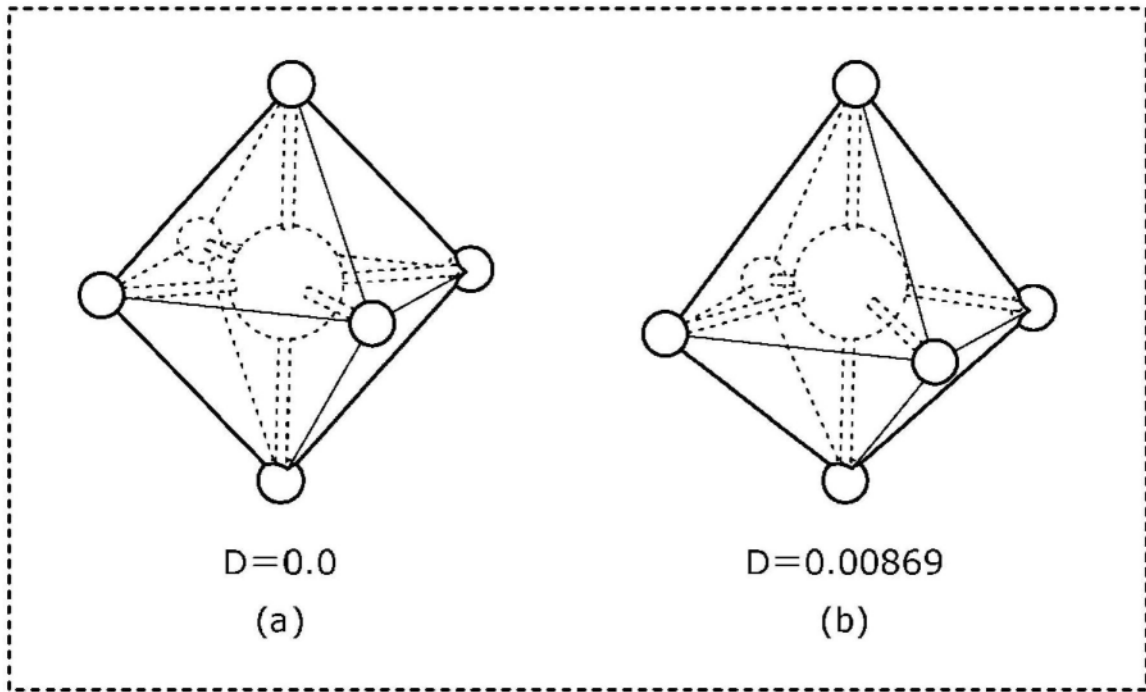


图16

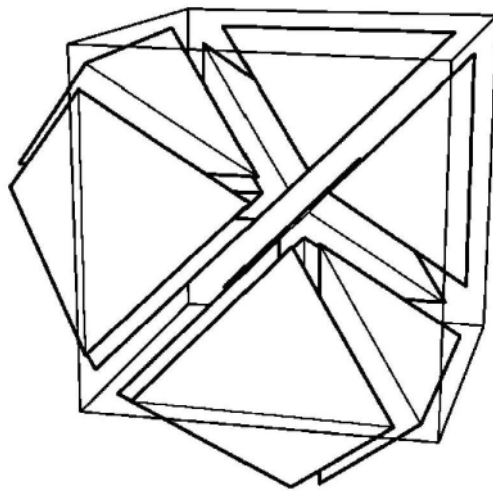


图17

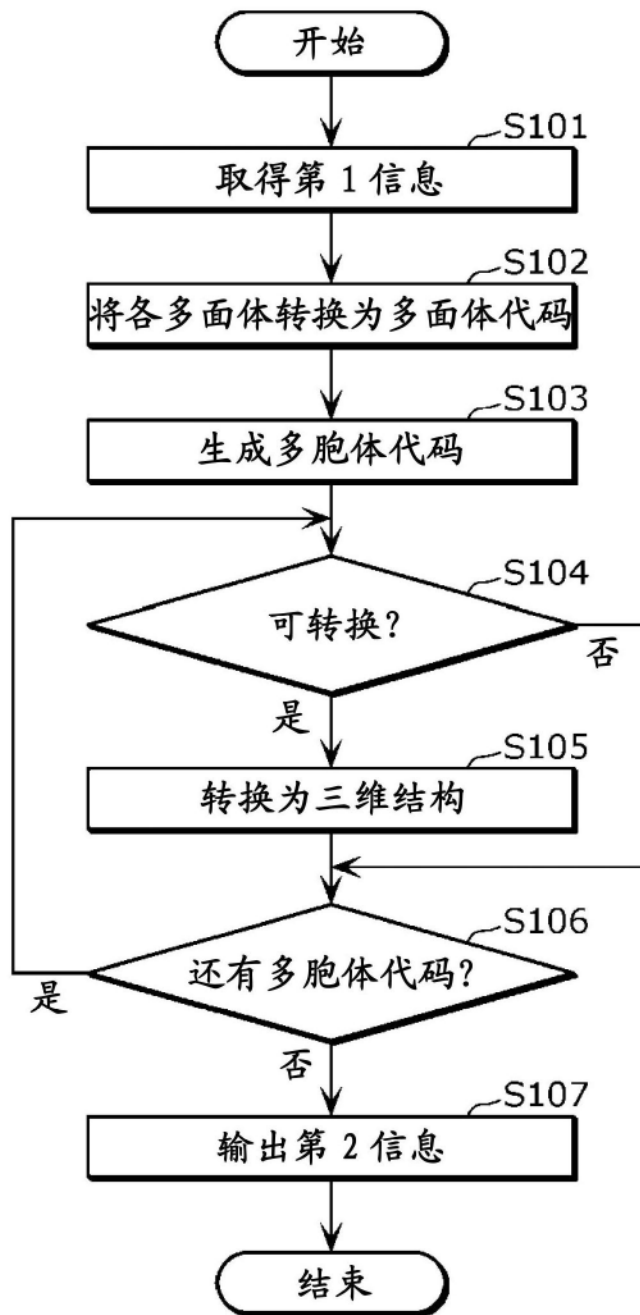


图18

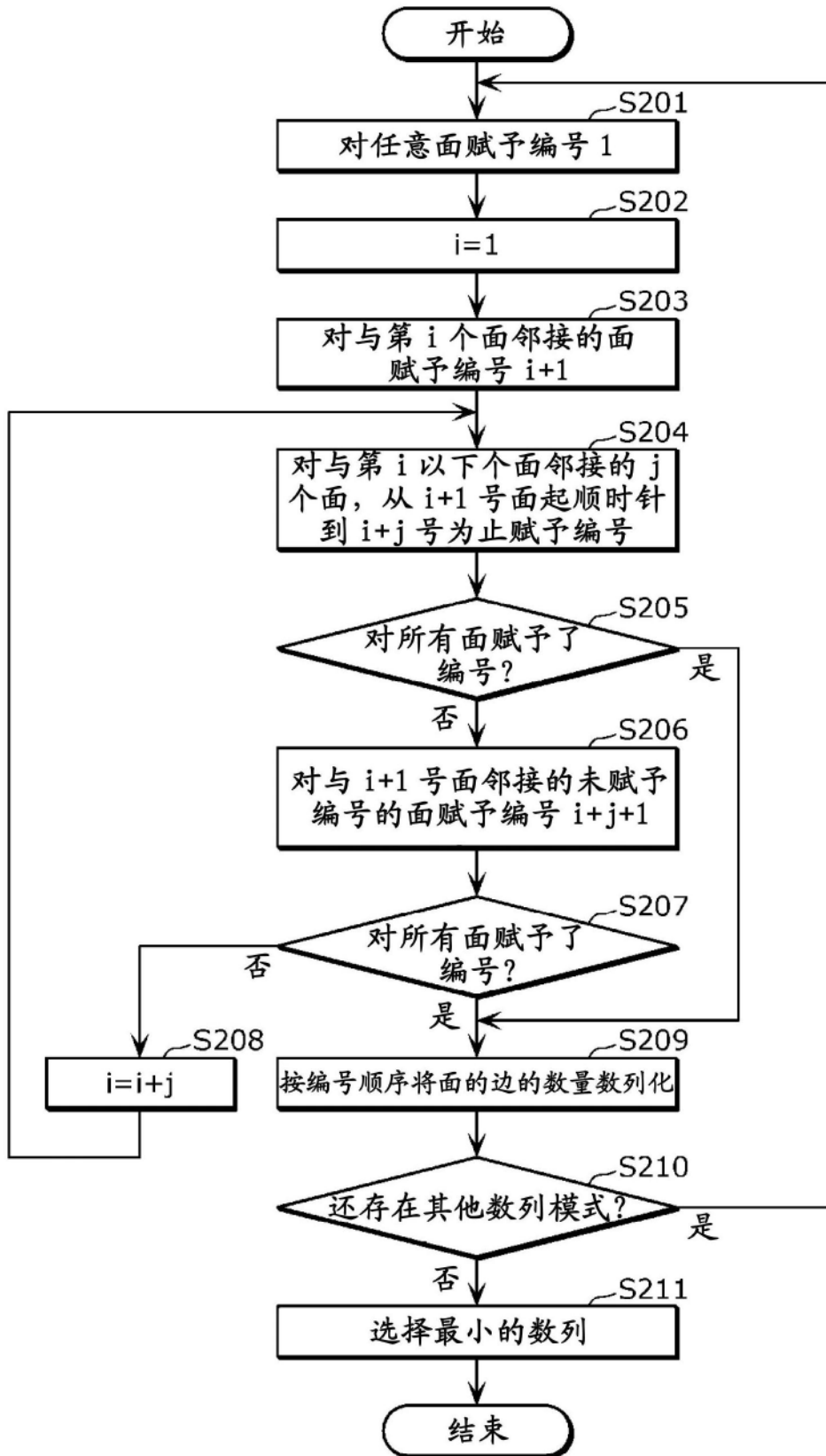


图19

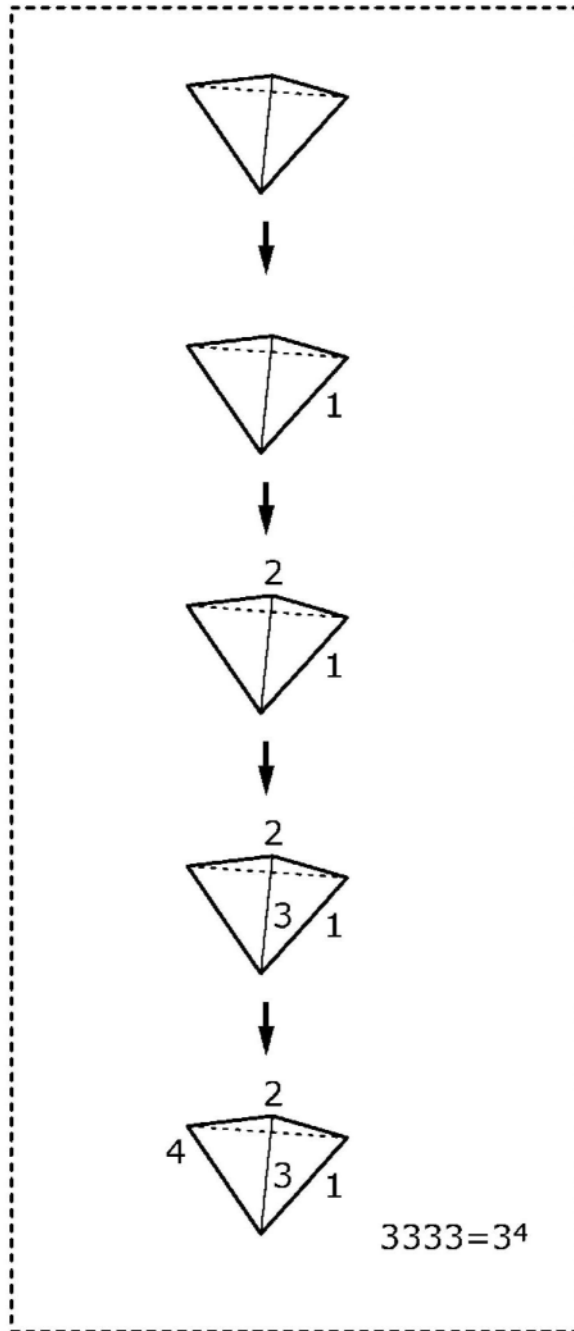


图20

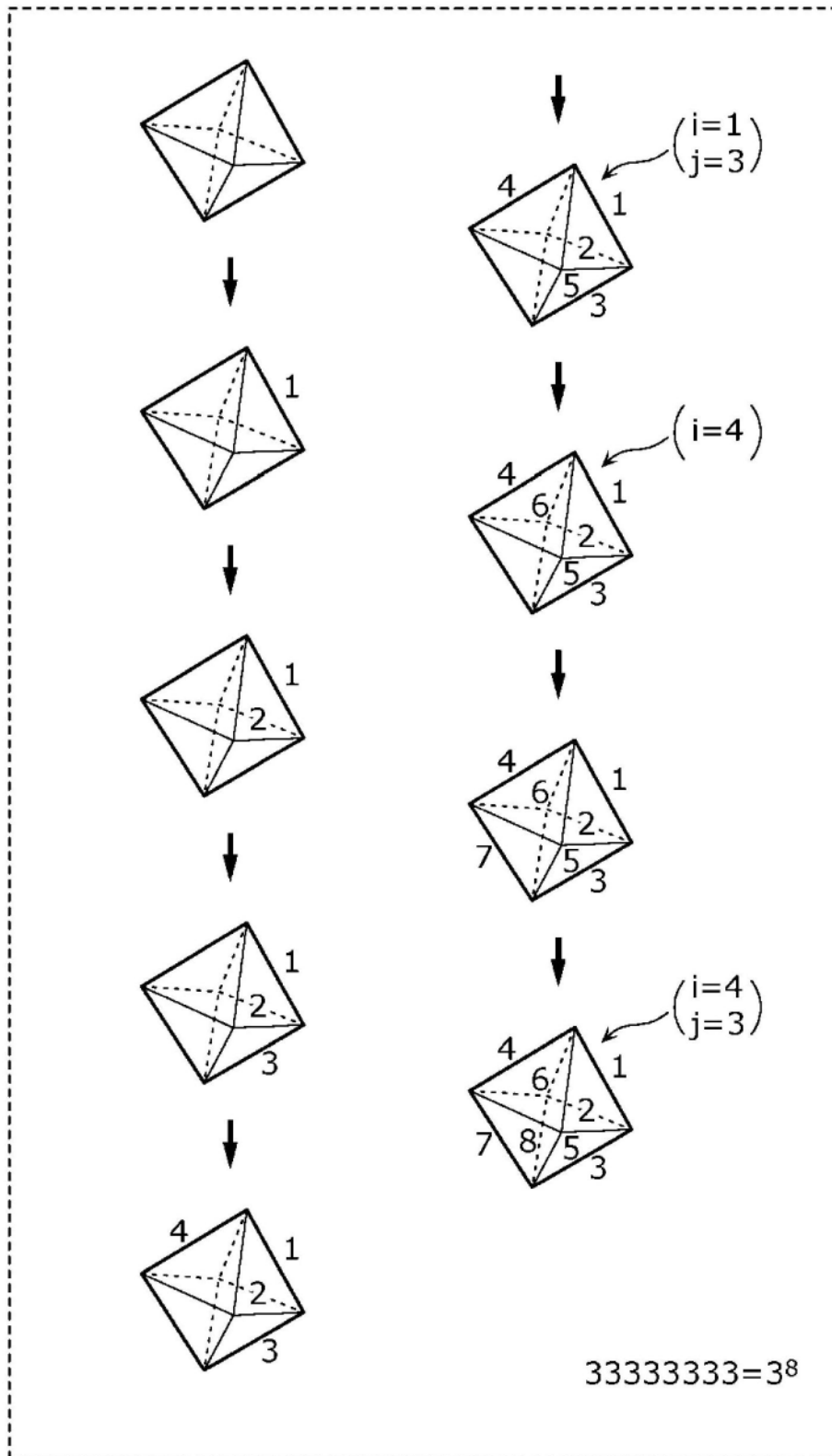


图21

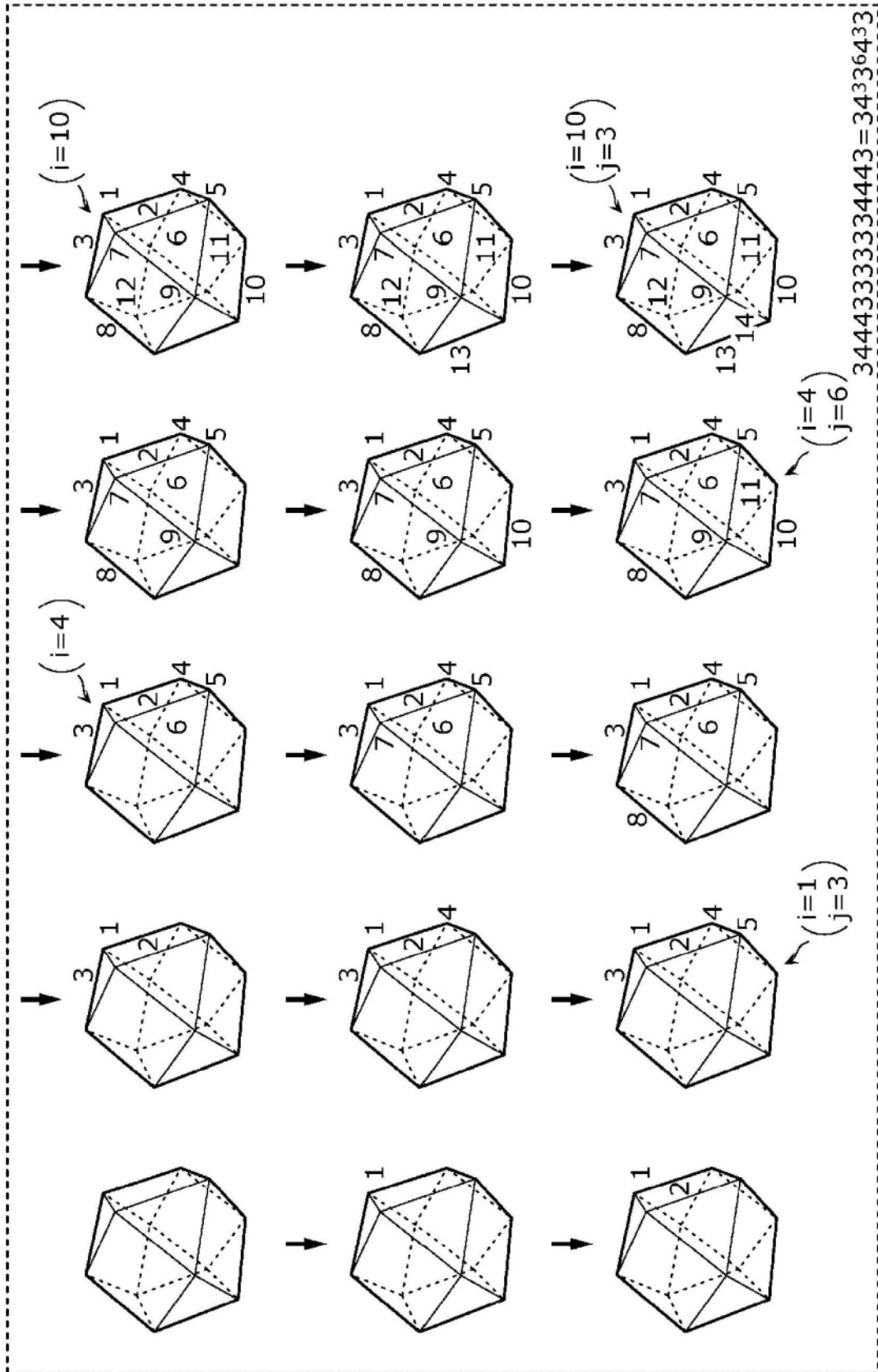


图22

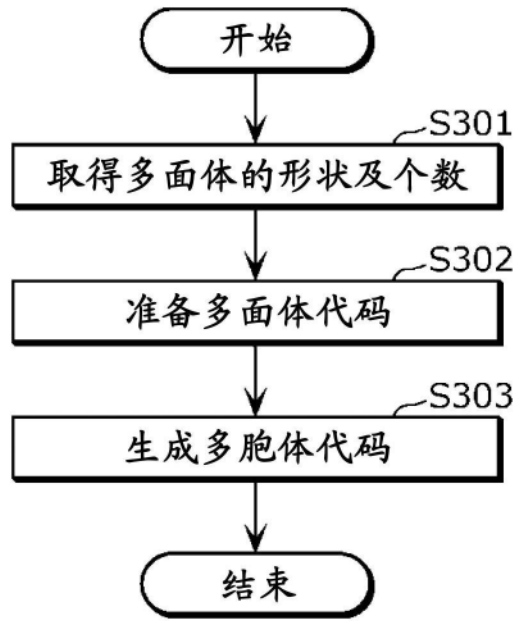


图23

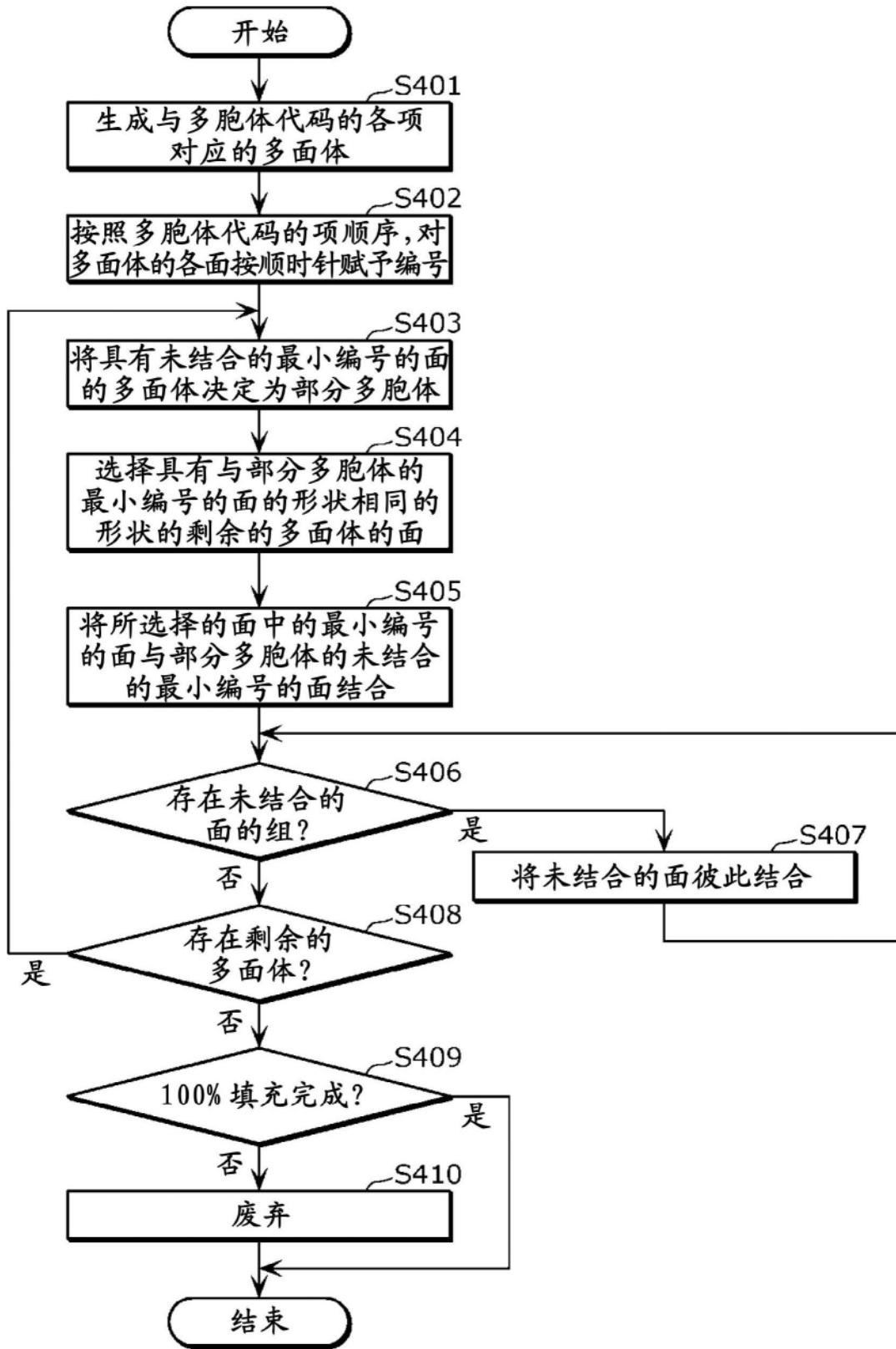


图24

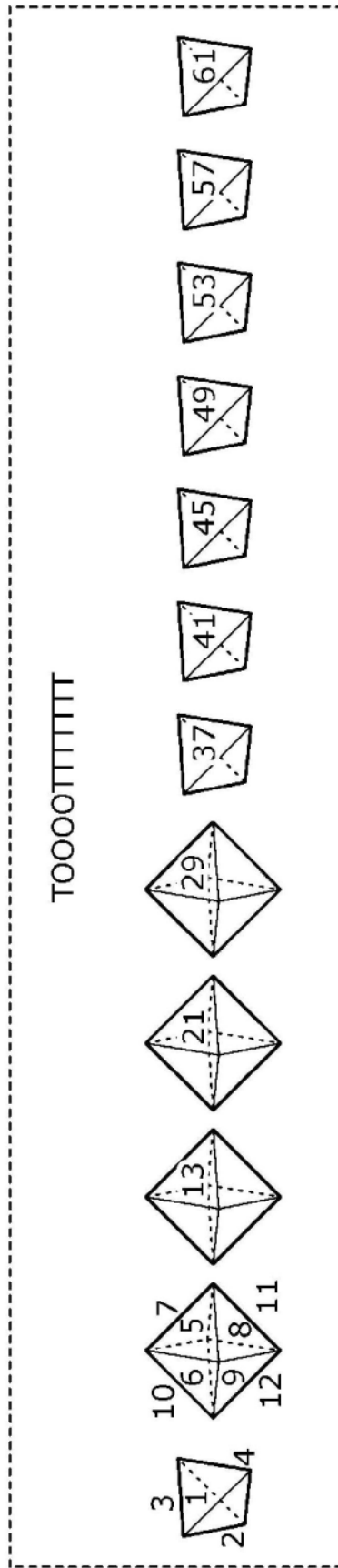


图25

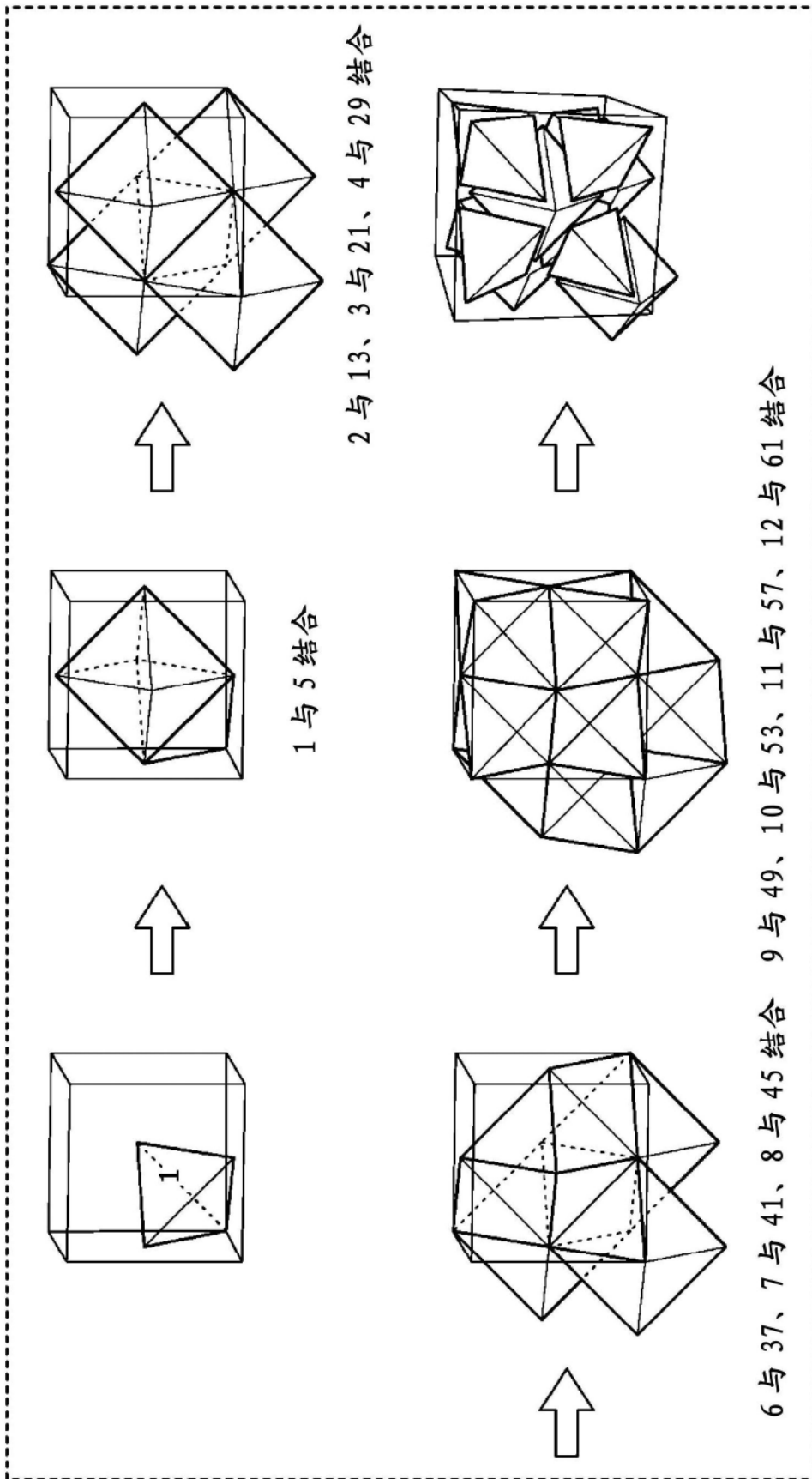


图26

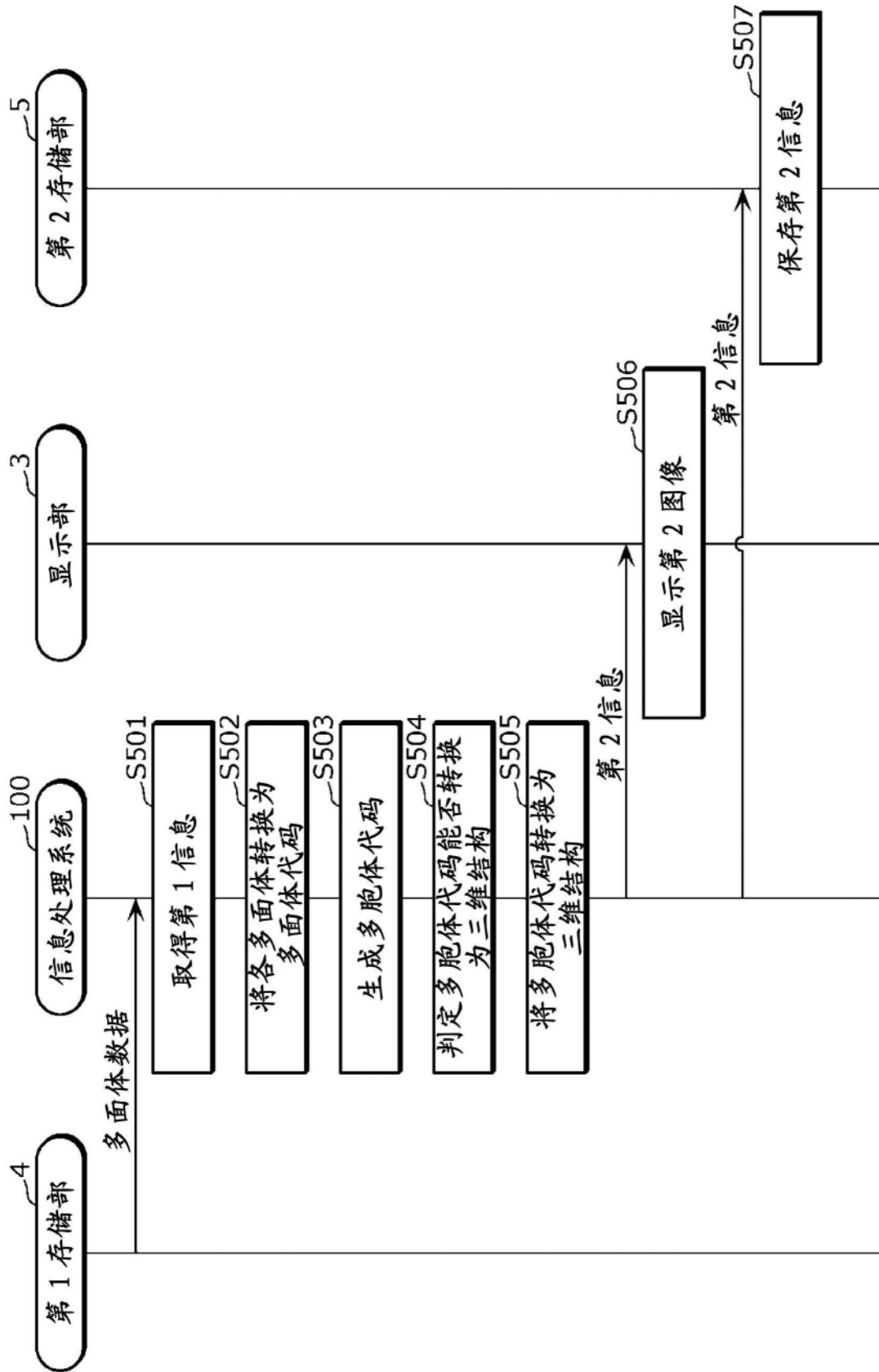


图27

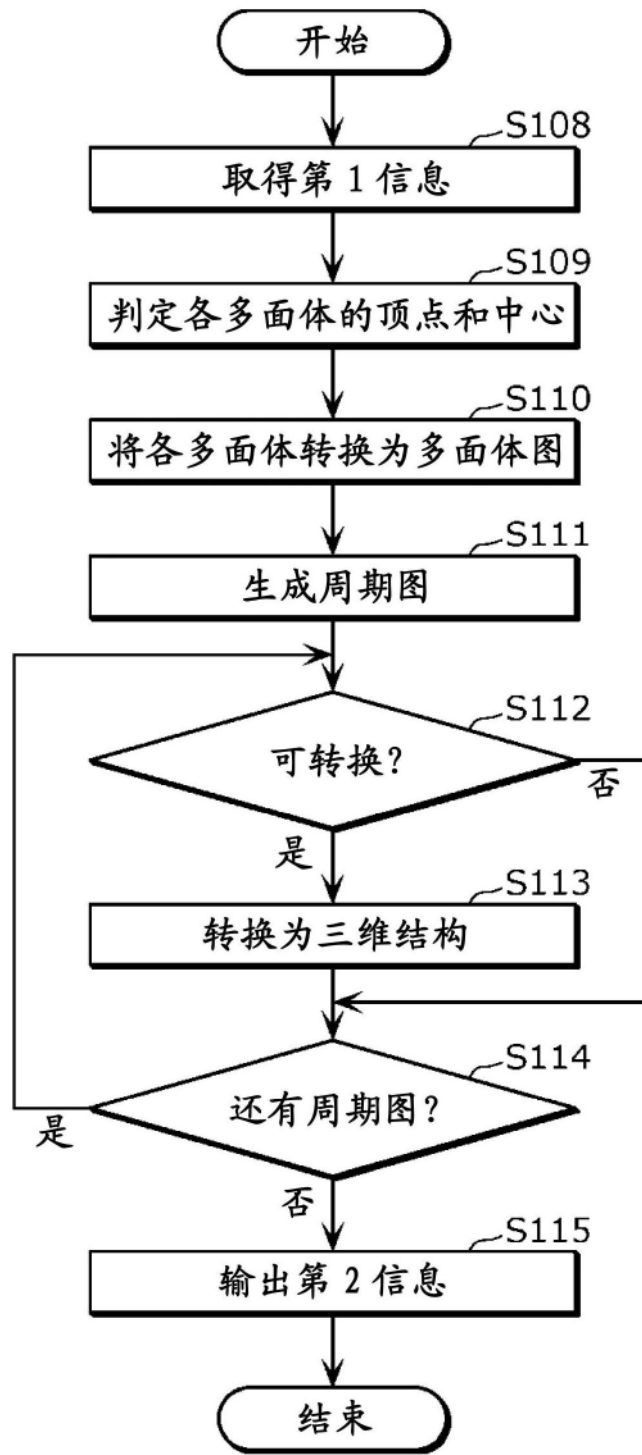


图28

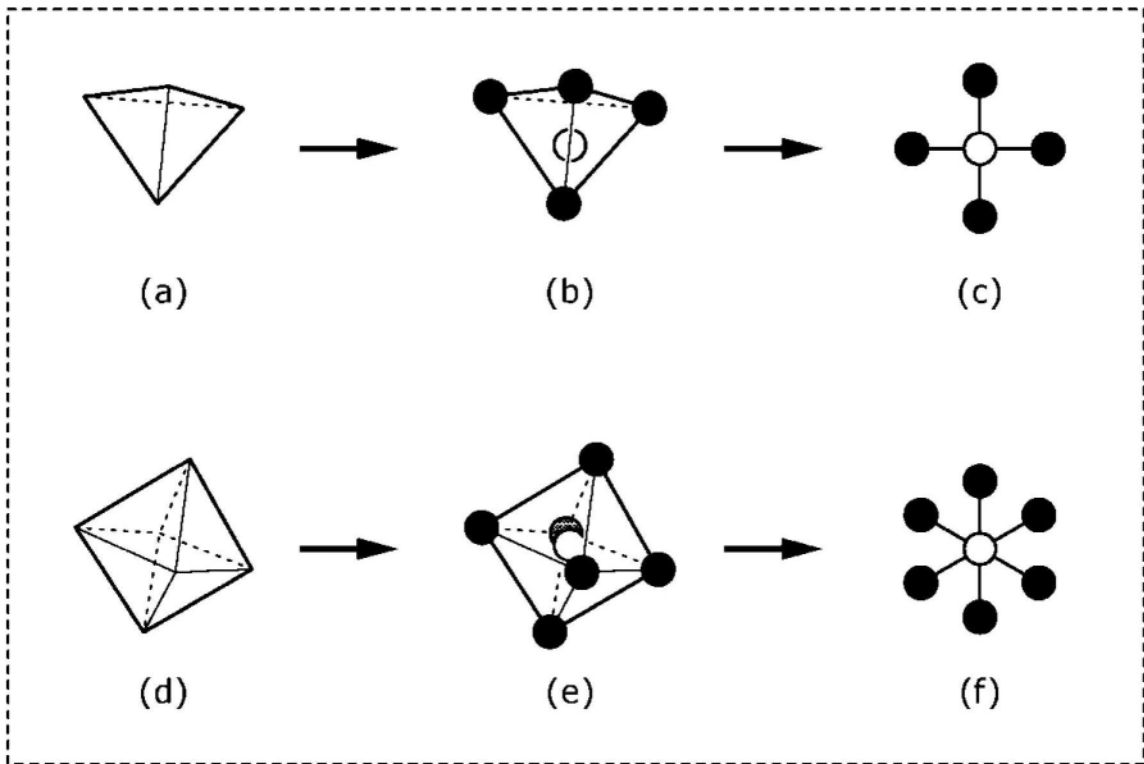


图29

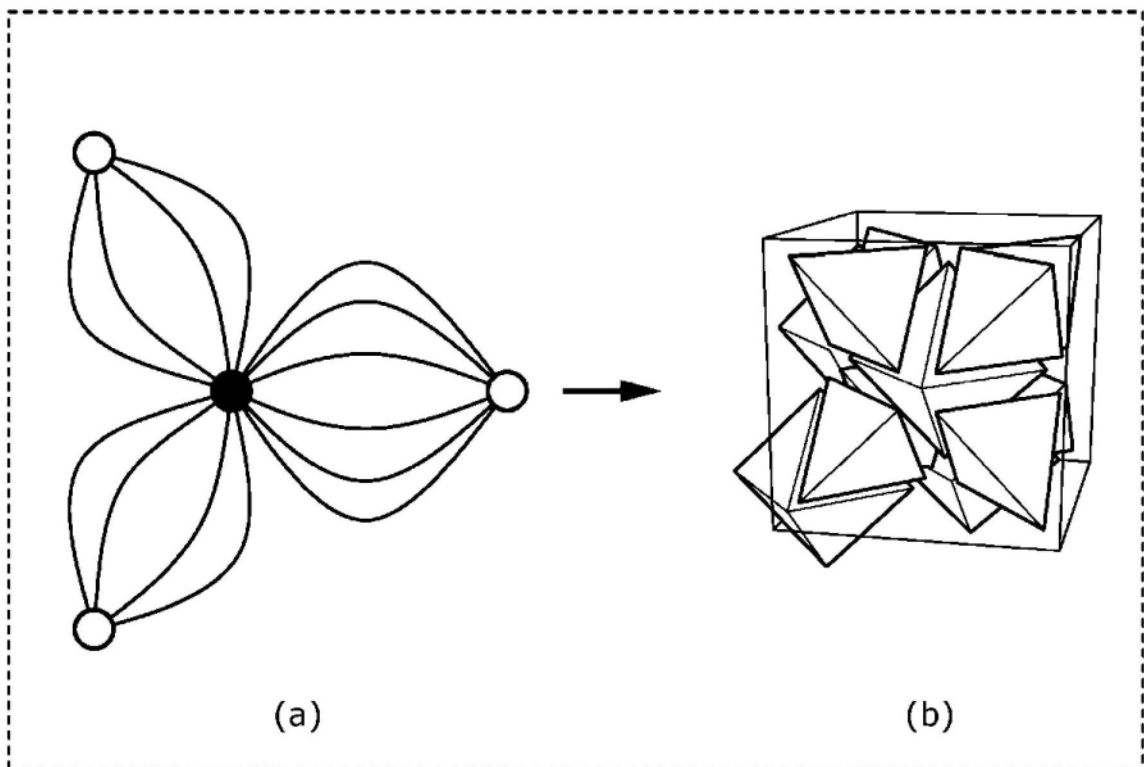


图30

(a)

请选择元素

1																	18																														
H	2											13	14	15	16	17	He																														
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																														
Na	Mg	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Al	Si	P	S	Cl	Ar																														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																														
Cs	Ba	—	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																														
Fr	Ra	—	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og																														
<table border="1"> <tr> <td>La</td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Ac</td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </table>																		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																	
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																	

斜线: 配置于多面体的中心
点: 配置于多面体的顶点

下一步

(b)

请输入组成

CuInSe2

下一步

图31

请选择下记元素的配置

	顶点	多面体中心	数
Cu		✓	1
In		✓	1
Se	✓		2

下一步

图32

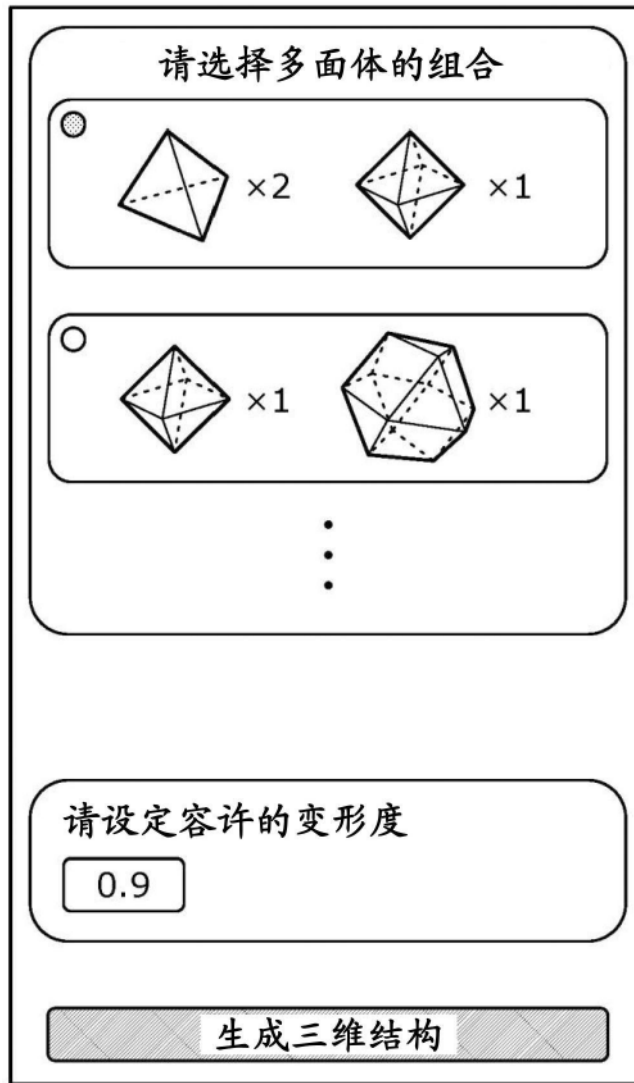


图33

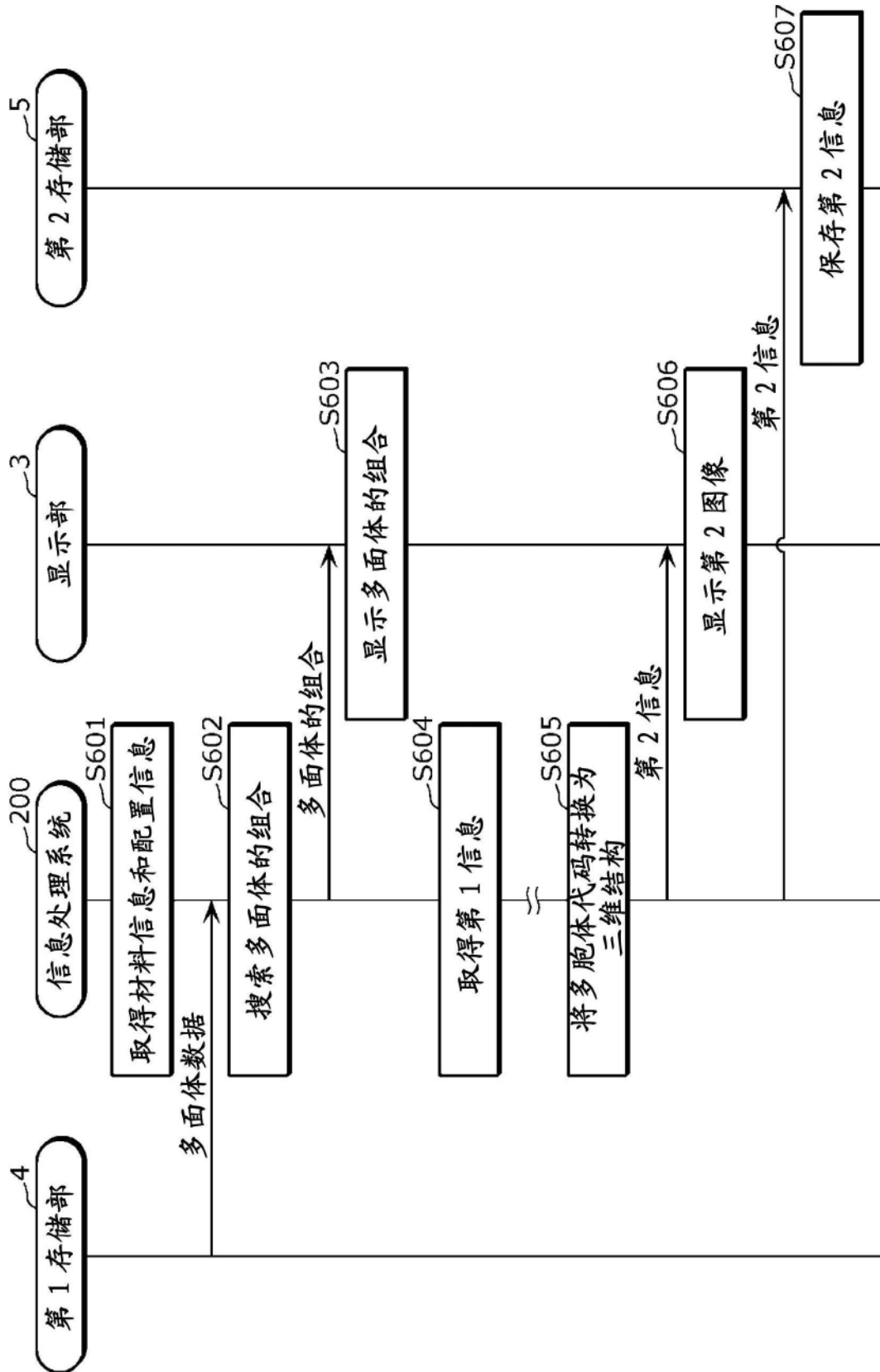


图34

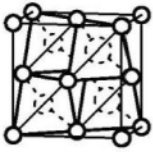
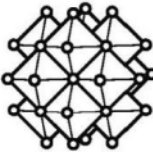
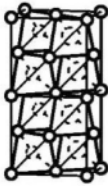
请选择下记元素的配置

	顶点	多面体中心
Cu		✓
In		✓
Se	✓	

输入多面体
信息

图35

生成结果 (•件)

	id:1 组成: CuInSe2 空间群: P-4m2 原子数: 8
	id:2 组成: CuInSe2 空间群: P4/mmm 原子数: 8
	id:3 组成: CuInSe2 空间群: I-42d 原子数: 16

< 1 2 3 4 ..100 >

导出所选择的三维结构

图36

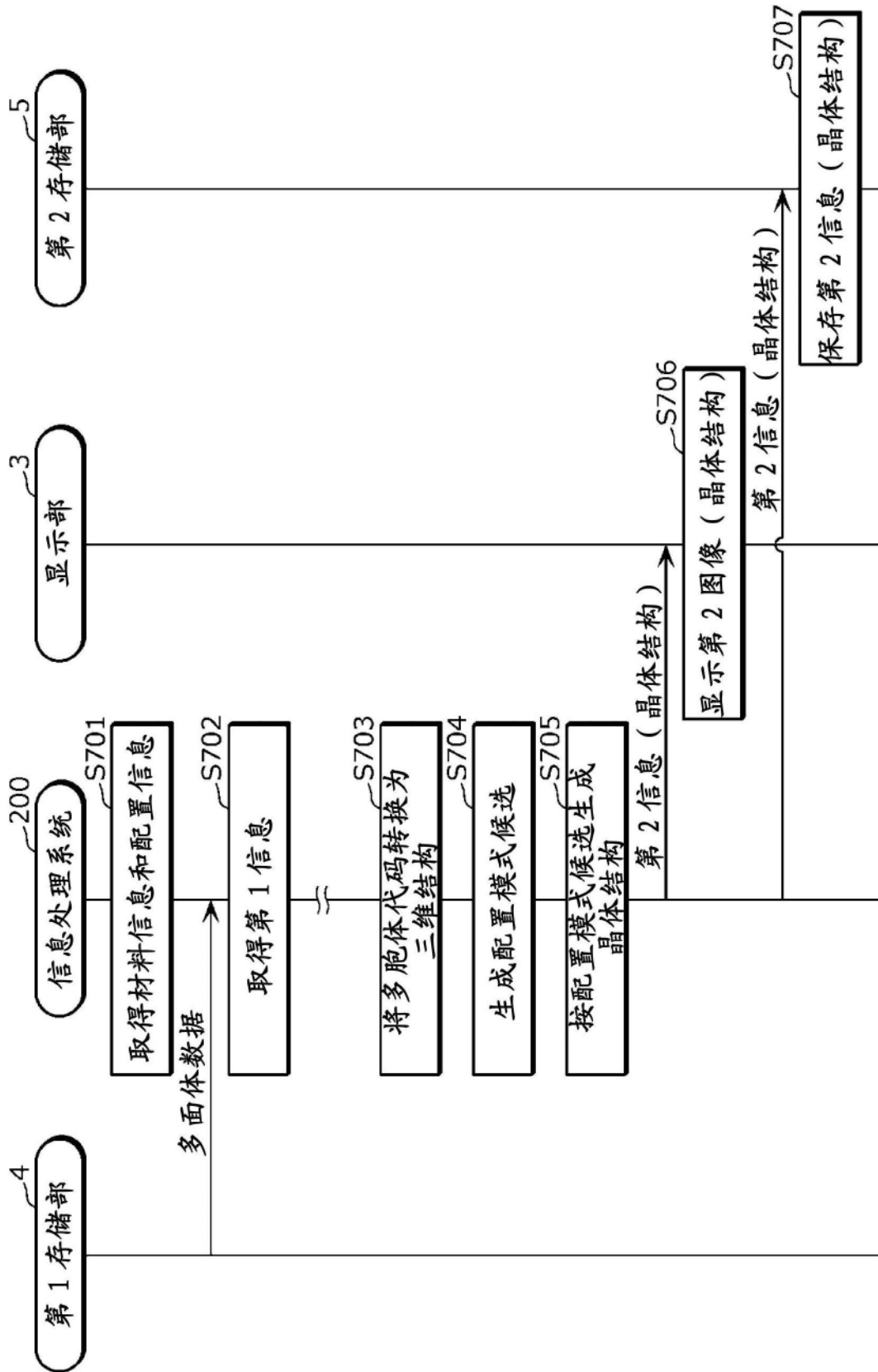


图37

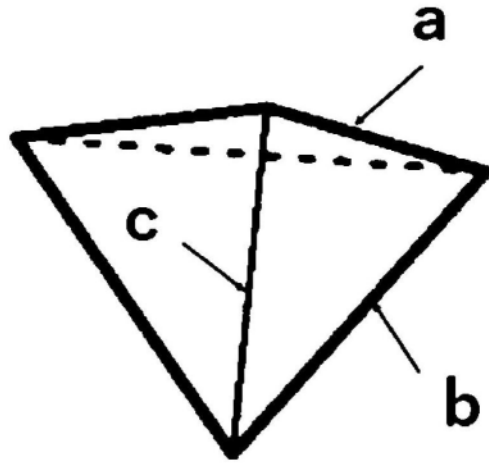


图38

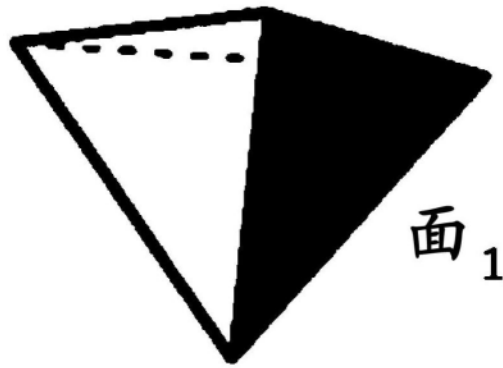


图39

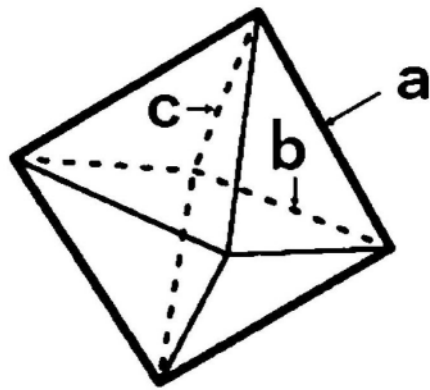


图40

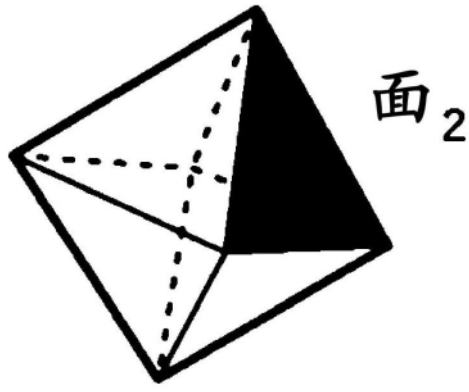


图41

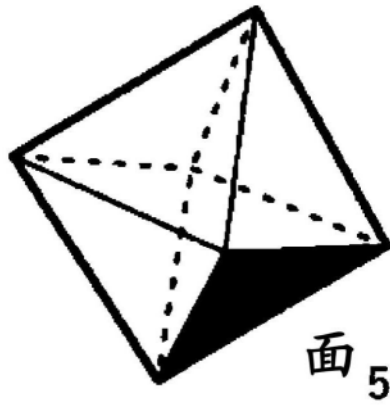


图42

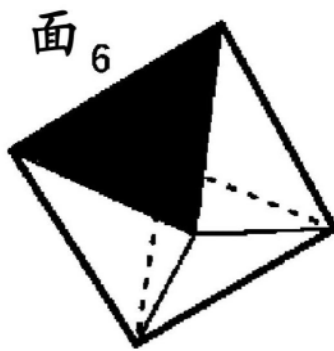


图43

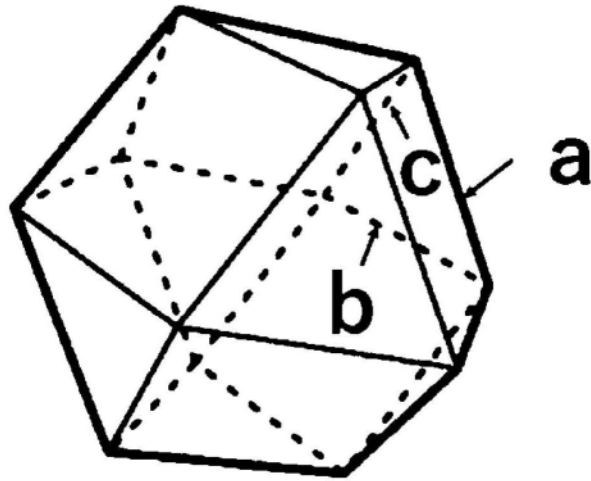


图44

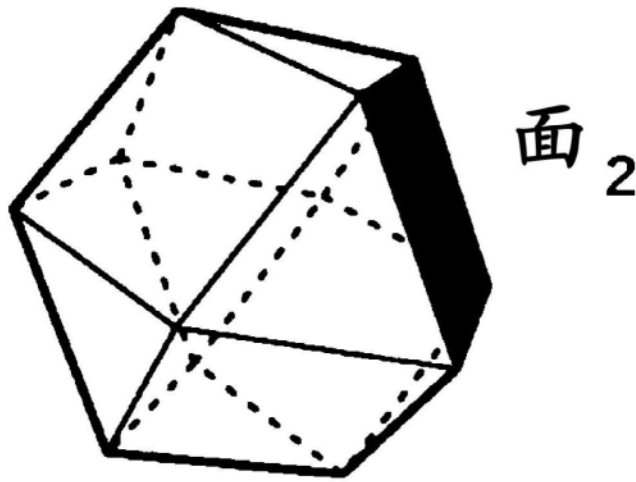


图45

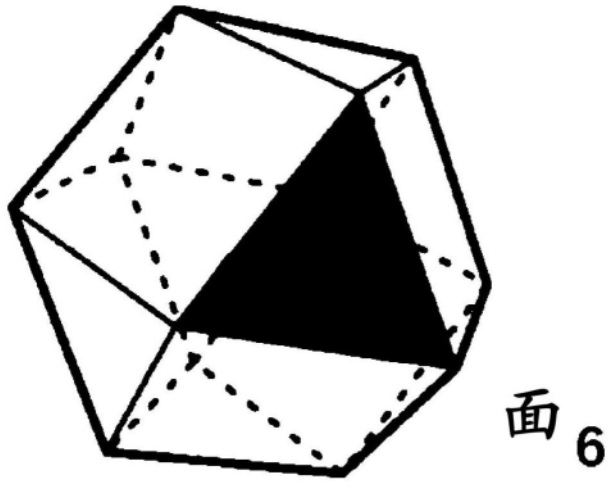


图46

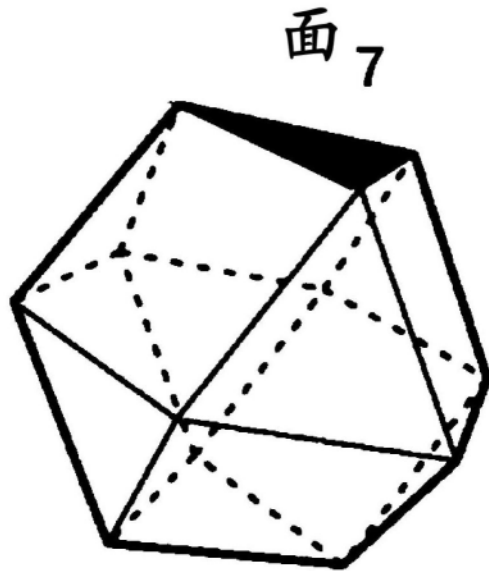


图47