

【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 4 年 8 月 12 日 (2022.8.12)

【国際公開番号】 WO2020/049994
【出願番号】 特願 2020-541109 (P2020-541109)
【国際特許分類】
G 1 6 C 10/00 (2019.01)
G 0 6 N 20/00 (2019.01)
【F I】
G 1 6 C 10/00
G 0 6 N 20/00

10

【手続補正書】
【提出日】 令和 4 年 8 月 3 日 (2022.8.3)
【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

物質の組成及び構造に関する物質情報から前記物質の電子密度を推定する電子密度推定装置における電子密度推定方法であって、

前記電子密度推定装置のコンピュータが、

(a 1) 前記物質情報を格納した学習データベースから第 1 入力データを取得し、

(a 2) 前記第 1 入力データを電子密度予測器に入力することで第 1 電子密度を算出し、

(a 3) 前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを用いた数値シミュレーションを実行して第 2 電子密度を算出し、前記数値シミュレーションは、前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを初期値に設定し、密度汎関数法を用いた電子密度を更新する処理を 1 回以上行う処理であり、前記第 2 電子密度は、前記密度汎関数法を用いて求めた収束値ではなく、

30

(a 4) 前記第 1 電子密度と前記第 2 電子密度との差分を最小化する前記電子密度予測器のパラメータを算出することで前記電子密度予測器を学習させ、

(a 5) 前記物質情報を格納したテストデータベースから第 2 入力データを取得し、前記パラメータが設定された前記電子密度予測器に前記第 2 入力データを入力し、第 3 電子密度を推定し、

(a 6) 推定された前記第 3 電子密度を出力する、

電子密度推定方法。

40

【請求項 2】

前記 (a 5) は、前記 (a 1) から前記 (a 4) までの処理が所定回数繰り返された後に実施される、

請求項 1 に記載の電子密度推定方法。

【請求項 3】

物質の組成及び構造に関する物質情報から前記物質の電子密度を推定する電子密度推定装置における電子密度推定方法であって、

前記電子密度推定装置のコンピュータが、

(a 1) 前記物質情報を格納した学習データベースから第 1 入力データを取得し、

(a 2) 前記第 1 入力データを電子密度予測器に入力することで第 1 電子密度を算出し、

50

(a 3) 前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを用いた数値シミュレーションを実行して第 2 電子密度を算出し、前記数値シミュレーションは、前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを初期値に設定し、密度汎関数法を用いた電子密度を更新する処理を 1 回以上行う処理であり、前記第 2 電子密度は、前記密度汎関数法を用いて求めた収束値ではなく、

(a 4) 前記第 1 電子密度と前記第 2 電子密度との差分を最小化する前記電子密度予測器のパラメータを算出することで前記電子密度予測器を学習させ、

(a 5) 前記 (a 1) から前記 (a 4) までの処理が所定回数繰り返された後に、前記物質情報を格納したテストデータベースから第 2 入力データを取得し、前記パラメータが設定された前記電子密度予測器に前記第 2 入力データを入力し、第 3 電子密度を推定し、

10

(a 6) 推定された前記第 3 電子密度を出力し、

前記 (a 3) では、

(b 1) 前記 (a 2) で更新された前記第 1 電子密度が所定の条件を満たす場合、前記数値シミュレーションを実施して前記第 2 電子密度を更新し、処理を前記 (a 4) に進める、

(b 2) 前記 (a 2) で更新された前記第 1 電子密度が前記所定の条件を満たさない場合、前記第 2 電子密度を更新せずに、処理を前記 (a 4) に進める、

電子密度推定方法。

【請求項 4】

前記所定の条件は、前記 (a 2) で更新された前記第 1 電子密度と第 4 電子密度との第 2 差分が、前記 (a 2) で更新された前記第 1 電子密度と第 5 電子密度との第 3 差分よりも大きくなることであり、

20

前記第 4 電子密度は、前記 (b 1) で更新された前記第 2 電子密度の算出に用いられた前記第 1 電子密度であり、

前記第 5 電子密度は、前記 (b 1) で更新された前記第 2 電子密度である、

請求項 3 記載の電子密度推定方法。

【請求項 5】

前記物質情報は、結晶学共通データフォーマットを用いて記載された情報である、

請求項 1～4 のいずれかに記載の電子密度推定方法。

【請求項 6】

30

前記 (a 4) では、前記第 2 電子密度が教師データとして用いられて前記電子密度予測器が学習される、

請求項 1～5 のいずれかに記載の電子密度推定方法。

【請求項 7】

前記 (a 6) では、前記第 3 電子密度を示す画像がディスプレイに表示される、

請求項 1～6 のいずれかに記載の電子密度推定方法。

【請求項 8】

物質の組成及び構造に関する物質情報から前記物質の電子密度を推定する電子密度推定装置であって、

前記物質情報を格納した学習データベースから第 1 入力データを取得するデータ取得部と、

40

前記第 1 入力データを電子密度予測器に入力することで第 1 電子密度を算出する電子密度予測部と、

前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを用いた数値シミュレーションを実行して第 2 電子密度を算出する電子密度更新部と、

前記数値シミュレーションは、前記第 1 入力データと前記第 1 電子密度とを初期値に設定し、密度汎関数法を用いた電子密度を更新する処理を 1 回以上行う処理であり、前記第 2 電子密度は、前記密度汎関数法を用いて求めた収束値ではなく、

前記第 1 電子密度と第 2 電子密度との差分を最小化する前記電子密度予測器のパラメータを算出することで前記電子密度予測器を学習させるパラメータ算出部と、

50

前記物質情報を格納したテストデータベースから第2入力データを取得し、前記パラメータが設定された前記電子密度予測器に前記第2入力データを入力し、第3電子密度を推定する電子密度推定部と、

推定された前記第3電子密度を出力する出力部とを備える、
電子密度推定装置。

【請求項9】

請求項1～7のいずれかに記載の電子密度推定方法をコンピュータに実行させる、
電子密度推定プログラム。

【請求項10】

コンピュータによって行われる電子密度推定方法であって、

10

(a1) 物質の組成及び構造に関する物質情報及びテストデータベースを格納した学習データベースから第1入力データを取得し、前記物質情報は前記第1入力データを含み、前記テストデータベースは第2入力データを含み、

(a2) 電子密度予測器は、前記第1入力データと第1パラメータに基づいて、第1電子密度 D_{11} を算出し、

(a3) 密度汎関数法を用いて電子密度を更新する計算を1回以上行い、第2電子密度を算出し、前記1回以上の計算は、前記第1入力データと前記第1電子密度 D_{11} に基づいた前記密度汎関数法を用いた計算を含み、前記第2電子密度は、前記密度汎関数法を用いて求めた収束値ではなく、

(a4) 前記電子密度予測器は、前記第1入力データと第 i パラメータに基づいて第1電子密度 D_{1i} を算出し ($i = 2 \sim n$)、

20

(a5) 前記(a1)から前記(a4)までの処理が所定回数繰り返された後に、前記第1電子密度 D_{1j} と前記第2電子密度の差分である第1差分 DF_{1j} を算出し ($j = 1 \sim n$)、前記第1差分 $DF_{11} \sim$ 前記第1差分 DF_{1n} のうち、最も小さい前記第1差分 DF_{1k} を検出し ($1 \leq k \leq n$)、

(a6) 前記第2入力データを取得し、前記第 k パラメータが設定された前記電子密度予測器に前記第2入力データを入力し、第3電子密度を推定し、

(a7) 推定された前記第3電子密度を出力し、
前記(a3)では、

(b1) 前記(a2)で更新された前記第1電子密度 D_{11} が所定の条件を満たす場合、前記1回以上の計算を実施して前記第2電子密度を更新し、処理を前記(a4)に進め

30

る、
(b2) 前記(a2)で更新された前記第1電子密度 D_{11} が前記所定の条件を満たさない場合、前記第2電子密度を更新せずに、処理を前記(a4)に進める、

電子密度推定方法。

40

50