

(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  
2023年10月5日(05.10.2023)



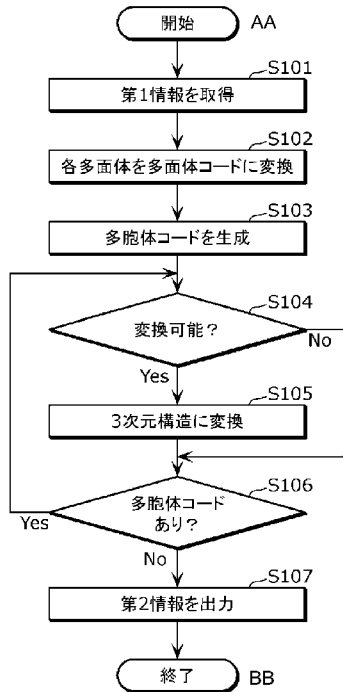
(10) 国際公開番号  
**WO 2023/188732 A1**

- (51) 国際特許分類:  
*G16C 20/40* (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2023/001944
- (22) 国際出願日: 2023年1月23日(23.01.2023)
- (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 2022-057957 2022年3月31日(31.03.2022) JP
- (71) 出願人: パナソニックIPマネジメント株式会社(PANASONIC INTELLECTUAL PROPERTY MANAGEMENT CO., LTD.) [JP/JP]; 〒5406207
- 大阪府大阪市中央区城見2丁目1番61号 Osaka (JP).
- (72) 発明者: 横山 智康(YOKOYAMA Tomoyasu). 市川 和秀(ICHIKAWA Kazuhide).
- (74) 代理人: 鎌田 健司, 外(KAMATA Kenji et al.); 〒5406207 大阪府大阪市中央区城見2丁目1番61号 パナソニックIPマネジメント株式会社内 Osaka (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, JP,

(54) Title: INFORMATION PROCESSING METHOD, INFORMATION PROCESSING SYSTEM, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 情報処理方法、情報処理システム、及びプログラム

[図18]



S101... Acquire first information  
S102... Convert each polyhedron into polyhedron code  
S103... Generate polychoron code  
S104... Is conversion possible?  
S105... Convert into three-dimensional structure  
S106... Is there polychoron code?  
S107... Output second information  
AA ...Start  
BB ...End

(57) Abstract: This information processing method is performed by a computer and comprises: a step (S101) for acquiring first information pertaining to two or more types of a plurality of polyhedrons having mutually different shapes; a step (S102 to S106) for generating, on the basis of the first information, second information pertaining to a 3-dimensional structure in which a plurality of polyhedrons are arranged; and a step (S107) for outputting the generated second information. The 3-dimensional structure is a structure in which the plurality of polyhedrons are arranged without a gap.



WO 2023/188732 A1

KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, 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))
- 

(57) 要約: 情報処理方法は、コンピュータが実行する情報処理方法であって、互いに形状が異なる2種類以上の複数の多面体に関する第1情報を取得するステップ(S101)と、第1情報に基づいて、複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップ(S102~S106)と、生成した第2情報を入力するステップ(S107)と、を含む。3次元構造は、複数の多面体が隙間なく配置された構造である。

## 明 細 書

発明の名称：情報処理方法、情報処理システム、及びプログラム

### 技術分野

[0001] 本開示は、3次元構造を生成する技術等に関する。

### 背景技術

[0002] 空間充填（タイリング、又はテセレーション）とは、空間内を図形で隙間なく埋め尽くす操作のことである。例えば、2次元空間での空間充填は平面充填と呼ばれ、平面図形を2次元空間に隙間なく埋め尽くす操作のことである。

[0003] 特許文献1は、3次元の立体を生成する方法を開示している。

[0004] 特許文献2は、住宅構造のシミュレーションを行う方法を開示している。

[0005] 非特許文献1は、多面体コード及び多胞体コードを開示している。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0006] 特許文献1：特表2018-516794号公報

特許文献2：特表2021-501934号公報

#### 非特許文献

[0007] 非特許文献1：Kengo, N., & Takahide, M. (2016). How to describe disordered structures, Scientific Reports, 6, 23455.

### 発明の概要

[0008] 本開示は、3次元空間での空間充填構造を生成することができる情報処理方法等を提供する。

[0009] 本開示の一態様に係る情報処理方法は、コンピュータが実行する情報処理方法であって、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得するステップと、前記第1情報に基づいて、前記複

数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップと、生成した前記第2情報を出力するステップと、を含み、前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である。

[0010] 本開示によれば、3次元空間での空間充填構造を生成することができる。

### 図面の簡単な説明

[0011] [図1]図1は、複数の多面体から生成される3次元構造の一例を示す図である。

[図2]図2は、複数の多面体から生成される3次元構造の他の一例を示す図である。

[図3]図3は、複数の多面体から生成される3次元構造の更に他の一例を示す図である。

[図4]図4は、3次元構造から生成される結晶構造の一例を示す図である。

[図5]図5は、実施の形態1に係る情報処理システムを含む全体構成を示すブロック図である。

[図6]図6は、第1記憶部に保存される多面体データの一例を示す図である。

[図7]図7は、第2記憶部に保存される第2情報の一例を示す図である。

[図8]図8は、実施の形態1の第1使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図9]図9は、実施の形態1の第1使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図10]図10は、ブラベ格子の一覧を示す図である。

[図11]図11は、実施の形態1の第2使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図12]図12は、3次元構造の対称性の一例を示す図である。

[図13]図13は、実施の形態1の第3使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図14]図14は、実施の形態1の第4使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図15]図15は、実施の形態1の第5使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図16]図16は、多面体の歪度の一例を示す図である。

[図17]図17は、歪みを有する3次元構造の一例を示す図である。

[図18]図18は、実施の形態1に係る情報処理システムの動作例を示すフローチャートである。

[図19]図19は、多面体から多面体コードを生成する過程の一例を示すフローチャートである。

[図20]図20は、正四面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。

[図21]図21は、正八面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。

[図22]図22は、立方八面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。

[図23]図23は、多面体コードから多胞体コードを生成する過程の一例を示すフローチャートである。

[図24]図24は、多胞体コードから3次元構造を生成する過程の一例を示すフローチャートである。

[図25]図25は、多胞体コードの具体例を示す図である。

[図26]図26は、多胞体コードから3次元構造を生成する過程の具体例を示す図である。

[図27]図27は、実施の形態1に係る情報処理システム、及び、表示部、第1記憶部、第2記憶部の動作例を示すシーケンス図である。

[図28]図28は、実施の形態1に係る情報処理システムの他の動作例を示すフローチャートである。

[図29]図29は、多面体を多面体グラフに変換する過程の具体例を示す図である。

[図30]図30は、周期グラフを3次元構造に変換する場合の具体例を示す図

である。

[図31]図31は、実施の形態2の第1使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図32]図32は、実施の形態2の第1使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図33]図33は、実施の形態2の第1使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図34]図34は、実施の形態2に係る情報処理システム、及び、表示部、第1記憶部、第2記憶部の第1動作例を示すシーケンス図である。

[図35]図35は、実施の形態2の第2使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図36]図36は、実施の形態2の第2使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図37]図37は、実施の形態2に係る情報処理システム、及び、表示部、第1記憶部、第2記憶部の第2動作例を示すシーケンス図である。

[図38]図38は、実施の形態3に係る情報処理システムを含む全体構成を示すブロック図である。

[図39]図39は、実施の形態3の使用例において表示部に表示される画像を示す図である。

[図40]図40は、建築物に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図41]図41は、装飾品に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図42]図42は、インテリアに関する3次元構造の一例を示す図である。

[図43]図43は、玩具に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図44]図44は、都市設計に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図45]図45は、収納に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図46]図46は、食に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図47]図47は、材料に関する3次元構造の一例を示す図である。

[図48]図48は、正四面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。

[図49]図49は、正四面体の面<sub>1</sub>を示す図である。

[図50]図50は、正八面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。

[図51]図51は、正八面体の面<sub>2</sub>を示す図である。

[図52]図52は、正八面体の面<sub>5</sub>を示す図である。

[図53]図53は、正八面体の面<sub>6</sub>を示す図である。

[図54]図54は、立方八面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。

[図55]図55は、立方八面体の面<sub>2</sub>を示す図である。

[図56]図56は、立方八面体の面<sub>6</sub>を示す図である。

[図57]図57は、立方八面体の面<sub>7</sub>を示す図である。

### 発明を実施するための形態

[0012] (本開示に至った知見)

従来、多くの2次元空間での空間充填構造が発見されている。一方で、近年、五角形からなる新しい2次元空間での空間充填構造が報告される等、古くから応用されている2次元空間での空間充填構造であっても、未知の空間充填構造が存在する。

[0013] また、2次元空間での空間充填構造の他に、3次元空間での空間充填構造も存在する。以下では、3次元空間での空間充填構造を「3次元構造」という。3次元構造は、多面体等の複数の立体が3次元空間に隙間なく埋め尽くされている構造である。ここでは特に、3次元構造は、複数の多面体が3次元空間に隙間なく配置された構造をいう。さらに言えば、3次元構造は、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体が3次元空間に隙間なく配置された構造をいう。なお、「複数の多面体が隙間なく配置された」とは、複数の多面体のうちのいずれの多面体においても、他の多面体と接する面の各頂点が、当該他の多面体において当該多面体と接する面の各頂点と同じ位置にあることをいう。また、互いに同じ面数を有する2つの多面体であっても、歪度又は大きさが互いに異なる場合は、互いに形状がことなる2種類の多面体に相当する。

[0014] 例えば、近年、3次元構造が材料の構造を表現するために応用され始めて

いる。材料の構造とは、具体的には、結晶材料又はアモルファス材料といった材料のミクロな構造等である。特に、無機材料の構造においては、ある原子は、複数の隣り合う原子と配位し、それらに取り囲まれて存在している。そして、無機材料の構造は、複数の隣り合う原子の各々の中心を結んでできる多面体（配位多面体）が3次元空間を隙間なく充填することで構成されている。つまり、無機材料の構造は、3次元構造とみなすことができる。

[0015] また、充填される配位多面体の組み合わせから、多種多様な3次元構造が存在する。図1は、複数の多面体から生成される3次元構造の一例を示す図である。例えば、図1の(a)に示す2つの正四面体と、1つの正八面体とから生成される3次元構造には、その積層の違いから、図1の(b)に示す面心立方格子構造（fcc型の構造）と、図1の(c)に示す六方最密充填構造（hcp型の構造）の2種類が存在する。図2は、複数の多面体から生成される3次元構造の他の一例を示す図である。例えば、1種類の多面体から構成されてはいるが、図2の(a)に示す1つの正四面体から生成される3次元構造には、その積層の違いから、図2の(b)に示す体心立方格子構造（bcc型の構造）と、図2の(c)に示すMgCu<sub>2</sub>型の構造との2種類が存在する。図3は、複数の多面体から生成される3次元構造の更に他の一例を示す図である。例えば、図3の(a)に示す1つの正八面体と、1つの立方八面体とから生成される3次元構造には、図3の(b)に示すペロブスカイト構造が存在する。なお、図3の(b)においては、1つの立方八面体を図示しているが、実際には中心にある正八面体の周囲に隙間なく複数の立方八面体が配置されている。

[0016] また、3次元構造は、材料の構造のみならず、例えば建造物のデザイン等、多様な用途において応用することができる可能性を秘めている。

[0017] しかしながら、未知の3次元構造を見つけるのは困難である。

[0018] 例えば、特許文献1は、隙間を許容した3次元空間図形を生成する方法を開示している。しかしながら、特許文献1には、複数の多面体が隙間なく配置された3次元構造を生成する方法は開示されていない。

- [0019] また、例えば、特許文献2は、3次元ブロックを組み合わせて住宅構造データを生成し、当該住宅構造データを用いて住宅構造のシミュレーションを行う方法を開示している。しかしながら、特許文献2では、形状の同じ3次元ブロックを組み合わせて住宅構造データを開示しているに過ぎず、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を用いて3次元構造を生成する方法は開示されていない。
- [0020] また、非特許文献1は、多面体を数列で記述する多面体コード、及び多胞体を数列で記述する多胞体コードを開示している。しかしながら、非特許文献1には、これらを用いて複数の多面体が隙間なく配置された3次元構造を生成する技術に関しては開示されていない。
- [0021] 上記の課題を解決するために、本開示の一態様に係る情報処理方法は、コンピュータが実行する情報処理方法であって、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得するステップと、前記第1情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップと、生成した前記第2情報を出力するステップと、を含み、前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である。
- [0022] これにより、3次元空間での空間充填構造を生成することができる。
- [0023] また、例えば、前記第2情報は、前記3次元構造を示す情報、前記3次元構造を表す数字若しくは文字を含む数列を示す情報、及び前記3次元構造を表す周期グラフを示す情報のうちの少なくとも1つを含んでもよい。
- [0024] これにより、3次元空間での空間充填構造を生成することができる。
- [0025] また、前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の各々の形状を示す形状情報を取得し、前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成してもよい。
- [0026] これにより、例えばユーザが指定した複数の多面体の各々の形状での制約のもと、3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザ

が所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0027] また、前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状ごとの数を示す個数情報を更に取得し、前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を、前記個数情報が示す形状ごとの数だけ隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成してもよい。

[0028] これにより、例えばユーザが指定した複数の多面体の形状ごとの数での制約のもと、3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザが所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0029] また、前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状ごとの構成比を示す構成比情報を更に取得し、前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を、前記構成比情報が示す形状ごとの構成比で隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成してもよい。

[0030] これにより、例えばユーザが指定した複数の多面体の形状ごとの構成比での制約のもと、3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザが所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0031] また、前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状の許容される歪度を示す歪度情報を更に取得し、前記第2情報を生成するステップでは、前記歪度情報が示す歪度を超えないように前記複数の多面体の少なくとも一部を歪ませた前記3次元構造に関する第2情報を生成してもよい。

[0032] これにより、例えばユーザが指定した複数の多面体の形状の許容される歪度での制約のもと、3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザが所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0033] また、前記歪度は、前記形状情報が示す多面体の形状を基準として、前記多面体の重心の位置、前記多面体の少なくとも1つの頂点の位置、前記多面体の少なくとも1つの辺の長さ、前記多面体の少なくとも2つの辺がなす角

度、及び前記多面体の少なくとも1つの面の面積のうちの少なくとも1つに基づいて決定されてもよい。

[0034] これにより、例えばユーザが指定した複数の多面体の形状の許容される歪度での制約のもと、3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザが所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0035] また、前記3次元構造の用途に関する第3情報を取得するステップを更に含み、前記第2情報を生成するステップでは、前記第1情報に基づいて生成した前記3次元構造に、前記第3情報が示す用途に基づく情報を付与した前記3次元構造に関する前記第2情報を生成してもよい。

[0036] これにより、ユーザが指定した用途に応じた3次元空間での空間充填構造を生成することができるので、ユーザが所望する3次元空間での空間充填構造を生成しやすい。

[0037] また、前記第2情報を生成するステップは、取得した前記第1情報を、前記複数の多面体をそれぞれ表す複数の第1数列に変換するステップと、変換した前記複数の第1数列を用いて生成された多胞体を表す第2数列を前記3次元構造に変換するステップと、を有してもよい。

[0038] これにより、複数の多面体の情報から3次元空間での空間充填構造を網羅的に生成することが可能となる。

[0039] また、前記第2情報を生成するステップは、取得した前記第1情報を、前記複数の多面体をそれぞれ表す複数の多面体グラフに変換するステップと、変換した前記複数の多面体グラフを用いて生成された周期グラフを前記3次元構造に変換するステップと、を有してもよい。

[0040] これにより、複数の多面体の情報から種々の方法で3次元空間での空間充填構造を網羅的に生成することが可能となる。

[0041] また、本開示の一態様に係る情報処理システムは、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報の入力を受け付ける第1画像を表示する表示部と、入力された前記第1情報に基づいて生成された、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を表す第2

画像を前記表示部に表示させる表示制御部と、を備え、前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である。

[0042] これにより、ユーザは、生成された3次元空間での空間充填構造を確認することができる。

[0043] また、前記表示部は、前記3次元構造の用途に関する第3情報の入力を受け付ける第3画像を更に表示し、前記3次元構造は、入力された前記第1情報に基づいて生成され、かつ、入力された前記第3情報が示す用途に基づく情報が付与された構造であってもよい。

[0044] これにより、ユーザは、所望の用途に応じた3次元空間での空間充填構造を確認することができる。

[0045] また、本開示の一態様に係るプログラムは、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得するステップと、前記第1情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップと、生成した前記第2情報を出力するステップと、をコンピュータに実行させ、前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である。

[0046] これにより、3次元空間での空間充填構造を生成することができる。

[0047] また、本開示の情報処理方法に含まれる特徴的な処理をコンピュータに実行させるコンピュータプログラムとして実現することもできる。そして、このようなコンピュータプログラムを、CD-ROM等のコンピュータ読取可能な非一時的な記録媒体又はインターネット等の通信ネットワークを介して流通させることができるのは、言うまでもない。

[0048] すなわち、本開示の技術によれば、複数の多面体の情報を入力することで、入力した複数の多面体を組み合わせてなる3次元構造を網羅的に生成することが可能となる。

[0049] 以下、実施の形態について、図面を参照しながら具体的に説明する。

[0050] なお、以下で説明する実施の形態は、いずれも本開示の包括的又は具体的な例を示すものである。以下の実施の形態で示される数値、形状、材料、構

成要素、構成要素の配置位置及び接続形態、ステップ、ステップの順序等は、一例であり、本開示を限定する主旨ではない。また、以下の実施の形態における構成要素のうち、最上位概念を示す独立請求項に記載されていない構成要素については、任意の構成要素として説明される。また、全ての実施の形態において、各々の内容を組み合わせることもできる。また、各図は、模式図であり、必ずしも厳密に図示されたものではない。また、各図において、同じ構成部材については同じ符号を付している。

[0051] また、本開示の実施の形態に係る情報処理システムは、全ての構成要素を1つのコンピュータが含むように構成してもよいし、複数の構成要素をそれぞれ複数のコンピュータに分散したシステムとして構成してもよい。

[0052] (実施の形態1)

以下、本開示の実施の形態1に係る情報処理システム100(情報処理方法、又はプログラム)について、図面を用いて詳細に説明する。実施の形態1では、3次元構造は、原子が配置された場合に結晶構造となる構造である。つまり、実施の形態1では、3次元構造の用途は、無機材料等の材料である。

[0053] [3次元構造の生成]

まず、実施の形態1の詳細な説明に先立ち、本開示の情報処理方法における3次元構造の生成について説明する。本開示の情報処理方法においては、3次元構造を数列あるいはグラフとして表現することにより、3次元構造を網羅的に生成することを実現している。なお、ここでいう「数列」は、数字だけでなく、アルファベット等の数字を置き換えた文字も含む。

[0054] 以下では、3次元構造を表現した数列を「無機遺伝子」と呼ぶこともある。無機遺伝子は、例えばK. Nishio等が提案した多胞体コード、又はO. Delgado-Friedrichs等が提案したSystre Key、若しくはD-Symbol、あるいはM. Krennらが提案した分子構造をアルファベットの列で表現できるSELFIEを3次元構造に応用したCRYSTAL-SELFIES等がある。言い換えれば、無機

遺伝子は、例えば、3次元構造に変換可能な多胞体コードである。

[0055] 一例として、A型ゼオライト(LTA)構造の多胞体コードは、「OHG<sup>4</sup>(HG)<sup>4</sup>H」という数列で表される。なお、当該数列において、「O」、「H」、「G」は多面体コードと呼ばれ、入力された多面体から決まる数列である。例えば、「O」は切頂八面体を意味しており、「46<sup>4</sup>(46)<sup>4</sup>4」という数列で表される。また、例えば、「H」は立方体を意味し、「46」という数列で表される。また、例えば、「G」は切頂立方八面体を意味し、「6(48)<sup>3</sup>(64)<sup>6</sup>(84)<sup>3</sup>6」という数列で表される。

[0056] この多胞体コードの並びを変えることで、同じ複数の多面体から構成される別の3次元構造を生成することができる。また、多面体コードを変えることで、任意の多面体を表現できる。このように、多胞体コードに代表される無機遺伝子を用いることで、複数の多面体の情報から3次元構造を網羅的に生成することが可能となる。

[0057] そして、このように生成した3次元構造において、各多面体の中心及び各多面体の頂点に適宜原子を配置することで、3次元構造から結晶構造を生成することも可能である。図4は、3次元構造から生成される結晶構造の一例を示す図である。例えば、図4の(a)に示す3次元構造(多胞体コードでは、「3<sup>4</sup>(3<sup>6</sup>)<sup>4</sup>(3<sup>4</sup>)<sup>6</sup>3<sup>4</sup>」で表される)から、図4の(b)に示す結晶構造を生成することが可能である。

[0058] ところで、一般に、分子構造は、グラフとして表現することができる。すなわち、分子構造は、化合物を構成する「原子」を“ノード”とし、「原子間の結合」をノードを繋ぐ“エッジ”としたグラフ構造として表現できる。例えば、分子構造をグラフとして表現し、分子構造を生成した例が、特開2021-081769号公報に開示されている。

[0059] 一方、結晶構造は、通常のグラフではなく、周期グラフで表現する必要がある。周期グラフは、結晶網(Crystal Net)とも呼ばれ、3次元に周期的なグラフのことである。ここで、「3次元に周期的」とは、3つの線形独立な並進が存在することである。一般に、結晶構造中の原子の結合

を定義することで、結晶構造を周期グラフに変換することができる。また、小谷・砂田理論 (Kotani-Sunada, 2000, Trans. Amer. Mat) を用いることにより、周期グラフは結晶構造へ一意に変換することが可能である。例えば、図4の(c)に示すように、2つの独立なノードと、これらをつなぐ4つのエッジをもつ周期グラフは、図4の(d)に示すダイヤモンド型の構造と相互変換が可能である。言い換えれば、周期グラフは、複数の多面体が隙間なく配置された構造を有し、かつ、原子が配置された場合に結晶構造となる構造である3次元構造に変換可能なグラフである。

[0060] [情報処理システム]

次に、実施の形態1で使用される情報処理システムの構成について説明する。

[0061] 図5は、実施の形態1に係る情報処理システム100を含む全体構成を示すブロック図である。情報処理システム100は、例えばパーソナルコンピュータ又はサーバ等のコンピュータとして構成されている。すなわち、情報処理システム100は、例えばクラウドコンピューティングにより実現されてもよい。実施の形態1では、情報処理システム100が据え置きコンピュータであることとして説明する。

[0062] 情報処理システム100は、取得部11と、生成部12と、出力部13と、を備える。また、情報処理システム100には、入力部2と、表示制御部30と、表示部3と、第1記憶部4と、第2記憶部5とが接続されている。入力部2、表示制御部30、及び表示部3は、例えばスマートフォン、タブレット端末、又はパーソナルコンピュータ等のユーザが利用する情報端末により構成されている。入力部2、表示制御部30、及び表示部3は、ユーザが利用する情報端末に含まれる、入力部、表示制御部、及び、表示部であってもよい。

[0063] 入力部2、表示制御部30、第1記憶部4、及び第2記憶部5は、いずれもLAN (Local Area Network) 等で情報処理システム

100と接続されていてもよいし、例えばインターネット等のネットワークを介して情報処理システム100と接続されていてもよい。

[0064] 入力部2は、ユーザの入力を受け付ける入力インタフェースであって、例えばキーボード、タッチセンサ、タッチパッド、又はマウス等で構成される。入力部2は、ユーザによる入力操作を受け付け、その入力操作に応じた信号を情報処理システム100に出力する。なお、本開示では、表示部3及び入力部2は、互いに独立して構成されているが、タッチパネルのように一体に構成されていてもよい。また、本開示では、情報処理システム100は、表示部3及び入力部2を備えていないが、これらを備えていてもよい。

[0065] 入力部2では、複数の多面体に関する第1情報の入力を受け付けられる。第1情報は、例えば多面体の種類、多面体の数、許容する歪度、又は許容する対称性等を含み得る。第1情報、及び入力部2での第1情報の入力についての詳細は、後述する。

[0066] 表示制御部30は、情報処理システム100の出力部13から出力される情報に基づいて、表示部3に画像等を表示させる。

[0067] 表示部3は、表示制御部30により制御されることで、画像等を表示する。表示部3は、例えば、液晶ディスプレイ、プラズマディスプレイ、又は有機EL (Electro-Luminescence) ディスプレイ等であるが、これらに限定されない。

[0068] 第1記憶部4は、多面体データベースを格納するための記録媒体である。記録媒体は、例えば、ハードディスクドライブ、RAM (Random Access Memory)、ROM (Read Only Memory)、又は半導体メモリ等である。なお、このような記録媒体は、揮発性であっても不揮発性であってもよい。多面体データベースは、多面体の図、多面体の頂点数、辺数、面数、又は面の形状等、多面体に関するデータを含む。多面体データベースに収録されている多面体の例としては、例えば正四面体、正六面体、正八面体、正十二面体、及び正二十面体等の正多面体である。また、多面体の例としては、例えば、切頂四面体、切頂六面体、切頂八面体

、切頂十二面体、切頂二十面体、立方八面体、二十・十二面体、斜方立方八面体、斜方二十・十二面体、斜方切頂立方八面体、斜方切頂二十・十二面体、変形立方体、及び変形十二面体等の半正多面体等である。多面体データは、入力部2でユーザが第1情報を入力する際に使用される。

[0069] 図6は、第1記憶部4に保存される多面体データの一例を示す図である。図6の(a)は、多面体(ここでは、正八面体)の構造を示しており、図6の(b)は、図6の(a)に示す多面体の構造を所定の記述形式(ここでは、xyzファイル形式)で記述したデータを示している。第1記憶部4には、例えば図6の(a)に示すような多面体の構造を示す画像と、図6の(b)に示すような所定の記述形式で記述したデータとが、多面体データとして保存される。

[0070] 第2記憶部5は、生成部12で生成された3次元構造に関する第2情報を格納するための記録媒体である。記録媒体は、例えば、ハードディスクドライブ、RAM(Random Access Memory)、ROM(Read Only Memory)、又は半導体メモリ等である。なお、このような記録媒体は、揮発性であっても不揮発性であってもよい。

[0071] 図7は、第2記憶部5に保存される第2情報の一例を示す図である。図7の(a)は、第2情報が示す3次元構造(ここでは、fcc型の構造)を示しており、図7の(b)は、図7の(a)に示す3次元構造を所定の記述形式(ここでは、D-Symbol形式)で記述したデータを示している。第2記憶部5には、例えば図7の(a)に示すような3次元構造を示す画像と、図7の(b)に示すような所定の記述形式で記述したデータとが、第2情報として保存される。第2情報には、例えば、3次元データ、グラフデータ、空間群、ワイコフラベル、セルサイズ、座標、又は多面体の最大歪み等が含まれる。

[0072] 第2記憶部5に保存されるデータのファイル形式(拡張子)は、例えば、\*.sldprt、\*.sldasm、\*.iam、\*.ipt、\*.model、\*.CATPart、\*.CATProduct、\*.3ds、又

は\*、max等である。ファイル形式（拡張子）については、「<https://www.data-henkan.com/extension-list>」のURLで示すサイトを参照されたい。

[0073] 取得部11は、互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得する。取得部11は、本開示の情報処理方法における、第1情報を取得するステップの実行主体である。具体的には、取得部11は、入力部2でユーザにより入力された第1情報を取得する。後述するように、ユーザは、表示部3に表示された、第1情報の入力を受け付ける第1画像を見ながら、第1情報を入力する操作を行う。

[0074] 生成部12は、取得部11が取得した第1情報に基づいて、複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。生成部12は、本開示の情報処理方法における、第2情報を生成するステップの実行主体である。実施の形態1では、生成部12は、取得した第1情報を、複数の多面体をそれぞれ表す複数の第1数列に変換する処理と、変換した複数の第1数列を用いて生成された多胞体を表す第2数列を3次元構造に変換する処理と、を実行する。すなわち、生成部12は、複数の多面体をそれぞれ多面体コード（第1数列）に変換する処理と、複数の多面体コードを用いて生成された多胞体コード（第2数列）を3次元構造に変換する処理と、を実行する。上記各処理の詳細については、後述する。

[0075] 出力部13は、画像等を表示制御部30に出力することで、画像等を表示部3に表示させる。また、出力部13は、生成部12が生成した第2情報を出力する。出力部13は、本開示の情報処理方法における、第2情報を出力するステップの実行主体である。具体的には、出力部13は、生成部12が生成した第2情報を表す第2画像を表示部3に表示させることで、第2情報を出力する。後述するように、ユーザは、表示部3に表示された第2画像を見ながら、第2記憶部5に保存させる第2情報を選択する操作を行う。

[0076] [使用例]

以下、実施の形態1に係る情報処理システム100の使用例を列挙する。

情報処理システム100は、以下に示す第1使用例～第5使用例のいずれか1つを適用してもよいし、複数の使用例を組み合わせ適用してもよい。また、以下では、第2使用例～第5使用例の説明においては、第1使用例と共通する点についての説明を省略する。

[0077] 図8及び図9は、いずれも実施の形態1の第1使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図8の(a)は、表示部3に表示される第1画像の一例を表している。第1画像は、第1記憶部4に保存されている多面体データを読み出すことで、出力部13により表示部3に表示される。

[0078] 第1使用例では、第1画像は、多面体の形状を選択するための形状選択領域と、単位構造（ここでは、ブラベ格子）を選択するための単位構造選択領域と、「3次元構造を生成」という実行アイコンと、を含んでいる。

[0079] 形状選択領域には、ユーザが選択可能な複数の多面体と、複数の多面体にそれぞれ対応する複数の選択用のボタンと、が表示されている。なお、形状選択領域においては、各多面体の形状の名称が表示されていてもよい。また、形状選択領域においては、各多面体は、静止画像ではなく、動画像により表示されていてもよい。ユーザは、形状選択領域において3次元構造に含めたい多面体を選択する。これにより、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、複数の多面体の各々の形状を示す形状情報を取得することになる。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、形状情報が示す形状の複数の多面体を隙間なく配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。図8の(a)に示す例では、ユーザは、正四面体と、正八面体と、を選択している。したがって、この場合、生成部12は、正四面体及び正八面体を隙間なく配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0080] なお、例えばユーザが情報処理システム100を運営する事業者に対して課金することにより、選択可能な多面体の種類を増やすことも可能である。図8の(a)に示す例では、形状選択領域における「オプション購入で使用可能」と記された欄には、ユーザが課金することにより、新たに選択可能な

多面体が表示される。

[0081] 単位構造選択領域には、ユーザが選択可能な単位構造（ここでは、ブラベ格子）の種類が表示されている。なお、図8の（a）に示す例では、ユーザは、「cubic（立方晶系）」及び「tetragonal（正方晶系）」のいずれか1つを選択可能となっているが、例えば図10に示すブラベ格子の一覧から1つを選択可能であってもよい。図10は、ブラベ格子の一覧を示す図である。

[0082] ユーザは、単位構造選択領域において単位構造（ここでは、ブラベ格子）を選択する。これにより、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、複数の多面体が隙間なく配置された単位構造の形状を示す単位構造情報を取得することになる。ここでは、単位構造情報は、結晶構造におけるブラベ格子を示す情報である。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、単位構造情報が示す少なくとも1つの単位構造（ここでは、ブラベ格子）を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0083] 図8の（b）は、表示部3に表示される第2画像の一例を表している。第2画像は、ユーザが第1画像における実行アイコンを選択し、生成部12が3次元構造に関する第2情報を生成した後に、表示部3に表示される。第2画像は、生成部12が生成した3次元構造の一覧を示す表と、「選択した3次元構造をエクスポート」という実行アイコンと、を含む。当該表においては、左から順に、エクスポートする3次元構造を選択するためのカラム、3次元構造ごとの識別番号（ID）を表示するカラム、3次元構造に含まれる複数の多面体の形状ごとの数（ここでは、構成比）を示すカラム、及び3次元構造の対称性（ここでは、空間群）を示すカラムが表示される。

[0084] ユーザは、保存したい3次元構造を選択し、実行アイコンを選択する。これにより、表示部3には、図9の（a）に示すように、選択した3次元構造を示す領域と、「画像を保存」という実行アイコンと、を含む画像が表示される。そして、ユーザは、選択した3次元構造を確認し、問題がなければ実

行アイコンを選択する。すると、表示部3には、図9の(b)に示すように、3次元構造の保存形式を選択するための選択領域と、「保存」という実行アイコンと、を含む画像が表示される。なお、図9の(b)に示す例では、ユーザは、「.slbprt」及び「.slbasn」のいずれか1つを選択可能となっているが、他の保存形式を選択可能であってもよい。ユーザが所望の保存形式を選択し、実行アイコンを選択することで、ユーザが選択した3次元構造に関する第2情報が第2記憶部5に保存される。

[0085] 図11は、実施の形態1の第2使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図11は、表示部3に表示される第1画像の一例を表している。第2使用例では、第1画像は、第1使用例とは異なり、単位構造選択領域の代わりに、3次元構造の対称性（ここでは、空間群）を指定するための対称性指定領域を含んでいる。

[0086] 対称性指定領域には、ユーザが所望する3次元構造の対称性（ここでは、空間群）を指定するためのテキストボックスが表示されている。空間群は、3次元構造の対称性を記述するために用いられる。図12は、3次元構造の対称性の一例を示す図である。図12の(a)に示す3次元構造は、空間群番号「225」の空間群「Fm $\bar{3}$ -m」が示す対称性を有している。また、図12の(b)に示す3次元構造は、空間群番号「139」の空間群「I4/mmm」が示す対称性を有している。空間群については、「[https://en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_space\\_groups](https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_space_groups)」のURLで示すサイトを参照されたい。

[0087] ユーザは、対称性指定領域においてテキストボックスに所望の空間群の番号を入力することで、3次元構造の対称性を指定する。なお、テキストボックスには、所望の空間群の番号の範囲が入力されてもよい。これにより、取得部11（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、3次元構造の対称性を示す対称性情報を取得することになる。ここでは、対称性情報は、結晶構造における空間群を示す情報である。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、

対称性情報が示す対称性（ここでは、空間群）を有する3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0088] なお、第2使用例において、第1画像の対称性指定領域には、テキストボックスの代わりに、ユーザが選択可能な複数の空間群が列挙されていてもよい。この場合、ユーザは、複数の空間群のうちのいずれか1つの空間群を選択すればよい。

[0089] 図13は、実施の形態1の第3使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図13は、表示部3に表示される第1画像の一例を表している。第3使用例では、第1画像は、第1使用例とは異なり、単位構造選択領域の代わりに、3次元構造に含まれる複数の多面体の数を、多面体の形状ごとに指定するための個数指定領域を含んでいる。

[0090] 個数指定領域には、形状選択領域で選択した多面体の形状の名称と、3次元構造に含める多面体の個数を指定するためのテキストボックスと、が表示されている。図13に示す例では、ユーザは、形状選択領域において正四面体と正八面体とを選択している。このため、個数指定領域には、正四面体の個数を指定するためのテキストボックスと、正八面体の個数を指定するためのテキストボックスと、が表示される。

[0091] ユーザは、個数指定領域においてテキストボックスに所望の個数を入力することで、3次元構造に含める複数の多面体の個数を指定する。これにより、取得部11（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、複数の多面体の形状ごとの数を示す個数情報を更に取得することになる。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、形状情報が示す形状の複数の多面体を、個数情報が示す形状ごとの数だけ隙間なく配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0092] 図14は、実施の形態1の第4使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図14は、表示部3に表示される第1画像の一例を表している。第4使用例では、第1画像は、第1使用例とは異なり、単位構造選択

領域の代わりに、3次元構造に含まれる多面体の形状ごとの構成比を指定するための構成比指定領域を含んでいる。

[0093] 構成比指定領域には、形状選択領域で選択した多面体の形状の名称と、3次元構造に含める多面体の構成比を指定するためのテキストボックスと、が表示されている。図14に示す例では、ユーザは、形状選択領域において正四面体と正八面体とを選択している。このため、構成比指定領域には、正四面体の構成比を指定するためのテキストボックスと、正八面体の構成比を指定するためのテキストボックスと、が表示される。

[0094] ユーザは、構成比指定領域においてテキストボックスに所望の構成比を入力することで、3次元構造に含める複数の多面体の形状ごとの構成比を指定する。これにより、取得部11（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、複数の多面体の形状ごとの構成比を示す構成比情報を更に取得することになる。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、形状情報が示す形状の複数の多面体を、構成比情報が示す形状ごとの構成比で隙間なく配置させた3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0095] 図15は、実施の形態1の第5使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図15の(a)は、表示部3に表示される第1画像の一例を表している。第5使用例では、第1画像は、第3使用例とは異なり、複数の多面体の形状の許容される歪度を指定するための歪度指定領域を含んでいる。

[0096] ここで、歪度は、形状情報が示す多面体の形状、つまり形状選択領域で表示される多面体の形状を基準として、当該多面体の形状を歪ませた場合のその度合いを示す。例えば、歪度は、形状情報が示す多面体の形状を基準として、多面体の重心の位置、多面体の少なくとも1つの頂点の位置、多面体の少なくとも1つの辺の長さ、多面体の少なくとも2つの辺がなす角度、及び多面体の少なくとも1つの面の面積のうちの少なくとも1つに基づいて決定される。

[0097] 例えば、形状情報が示す形状の多面体を組み合わせた際に、複数の多面体を隙間なく配置できない場合がある。このような場合、複数の多面体のうちの少なくとも1以上の多面体の形状を歪ませることで、複数の多面体を隙間なく配置させることが可能である。そこで、第5使用例では、生成部12は、ユーザが許容する歪度の範囲内で、3次元構造の生成を試みる。

[0098] 歪度は、例えばBaurの方法を用いて、以下の式(1)により表される。式(1)において、「D」は歪度、「 $l_i$ 」は多面体の中心からi番目の頂点までの距離、「 $l_{av}$ 」は多面体の中心から頂点までの平均距離を示す。

[0099] [数1]

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

[0100] また、歪度は、例えばRobinsonの方法(quadratic elongation)を用いて、以下の式(2)により表される。式(2)において、「 $\lambda$ 」は歪度、「 $l_i$ 」は多面体の中心からi番目の頂点までの距離、「 $l_0$ 」は同じ体積の正多面体の中心から頂点までの距離を示す。

[0101] [数2]

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

[0102] 図16は、多面体の歪度の一例を示す図である。図16の(a)は、歪度「D」が「0.0」の場合、つまり歪みを有しない多面体(ここでは、正四面体)の形状を示す。一方、図16の(b)は、歪度「D」が「0.00869」の場合、つまり歪みを有する多面体(ここでは、正四面体の形状)を示す。図17は、歪みを有する3次元構造の一例を示す図である。図17は、複数の歪みを有する多面体(ここでは、正四面体を歪ませた多面体)を隙間なく配置させた3次元構造(ここでは、bcc型の構造)を示す。

[0103] 歪度指定領域には、複数の多面体の形状の許容される歪度を指定するためのテキストボックスが表示されている。ユーザは、歪度指定領域においてテ

キストボックスに所望の歪度を入力することで、複数の多面体の形状の許容される歪度を指定する。なお、テキストボックスには、所望の歪度の範囲が入力されてもよい。これにより、取得部11（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、複数の多面体の形状の許容される歪度を示す歪度情報を更に取得することになる。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、歪度情報が示す歪度を超えないように複数の多面体の少なくとも一部を歪ませた3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0104] 図15の(b)は、表示部3に表示される第2画像の一例を表している。第5使用例では、第2画像は、第1使用例とは異なり、生成部12が生成した3次元構造の一覧を示す表において、3次元構造の有する歪みの合計である合計歪を表示するカラムを更に含んでいる。

[0105] [動作]

以下、実施の形態1に係る情報処理システム100の動作（つまり、情報処理方法）について説明する。図18は、実施の形態1に係る情報処理システム100の動作例を示すフローチャートである。

[0106] (ステップS101)

取得部11は、第1情報を取得する。第1情報は、上述のように、第1記憶部4に保存されている多面体データを読み出して表示部3に表示される第1画像を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力（選択）することで、取得部11に取得される。なお、第1情報は、第1画像を参照せずに、ユーザが入力部2を用いてオリジナルのデータを入力することで、取得部11に取得されてもよい。

[0107] (ステップS102)

生成部12は、取得部11が取得した第1情報を、複数の多面体をそれぞれ表す複数の第1数列に変換する処理を実行する。ここでは、生成部12は、第1情報に含まれる各多面体を多面体コードに変換する。

[0108] (ステップS103)

生成部12は、変換した複数の第1数列を用いて多胞体を表す第2数列を生成する処理を実行する。ここでは、生成部12は、変換により得られた複数の多面体コードに基づいて、複数の多胞体コードを生成する。

[0109] (ステップS104)

生成部12は、生成した多胞体コードが3次元構造に変換可能か否かを判定する。生成部12は、例えば、互いに接する2つの多面体の面が同じか否か、複数の多面体が隙間なく配置されたか否か（言い換えれば、充填率が100%か否か）により、多胞体コードの3次元構造への変換の可否を判定できる。変換が可能であると判定した場合（ステップS104：Yes）、生成部12は、次にステップS105を実行する。変換が不可能であると判定した場合（ステップS104：No）、生成部12は、次にステップS106を実行する。

[0110] (ステップS105)

生成部12は、多胞体コードを3次元構造に変換する処理を実行する。変換処理には、例えば、上述のK. Nishio等の手法、又はO. Delgado-Friedrichs等の手法を用いることが可能である。生成部12は、次にステップS106を実行する。

[0111] (ステップS106)

生成部12は、変換可能であるか否かを未だ判定していない多胞体コードが存在するか否かを判断する。未だ判定していない多胞体コードがある場合（S106：Yes）、生成部12は、ステップS104に戻る。全ての多胞体コードについて判定した場合（S106：No）、生成部12の処理が完了する。そして、情報処理システム100（情報処理方法）は、次にステップS107を実行する。

[0112] (ステップS107)

出力部13は、生成部12が生成した第2情報を出力する処理を実行する。ここでは、出力部13は、生成部12が生成した第2情報を表す第2画像を表示部3に表示させることで、第2情報を出力する。

[0113] 表示部3は表示制御部30を含んでもよい。表示制御部30を含む表示部3を表示部3Aと呼んでもよい。出力部13は、生成部12が生成した第2情報を、表示部3Aに出力してもよい。これにより、表示部3Aは第2情報を表示してもよい。つまり、出力部13は、表示部3Aに第2情報を表示させてもよい。

[0114] 生成部12が、全ての多胞体コードを3次元構造に変換できない場合、第2情報は生成されない。生成部12が、全ての多胞体コードを3次元構造に変換できない場合、第2情報は表示部3されない。

[0115] 次に、多面体を多面体コードに変換する処理について、図面を用いて具体的に説明する。図19は、多面体から多面体コードを生成する過程の一例を示すフローチャートである。

[0116] (ステップS201)

生成部12は、多面体の任意の面に対して、番号「1」を付与する。

[0117] (ステップS202)

生成部12は、変数「i」に「1」を代入する。

[0118] (ステップS203)

生成部12は、「i」番目の面と隣接する面に、番号「i+1」を付与する。

[0119] (ステップS204)

生成部12は、「i」以下の番目の面と隣接する変数「j」個の面に対し、「i+1」番の面から時計回りに「i+j」番の面まで番号を付与する。変数「j」には、「i」以下の番目の面と隣接する面の数が代入される。

[0120] (ステップS205)

生成部12は、多面体の全ての面に番号を付与したか否かを判断する。多面体の全ての面に番号を付与した場合(ステップS205:Yes)、生成部12は、次にステップS209を実行する。多面体の全ての面に未だ番号を付与していない場合(ステップS205:No)、生成部12は、次にステップS206を実行する。

[0121] (ステップS206)

生成部12は、「 $i+1$ 」番の面と隣接する、番号が付与されていない面に番号「 $i+j+1$ 」を付与する。

[0122] (ステップS207)

生成部12は、多面体の全ての面に番号を付与したか否かを判断する。多面体の全ての面に番号を付与した場合(ステップS207:Yes)、生成部12は、次にステップS209を実行する。多面体の全ての面に未だ番号を付与していない場合(ステップS207:No)、生成部12は、次にステップS208を実行する。

[0123] (ステップS208)

生成部12は、変数「 $i$ 」に「 $i+j$ 」を代入する。そして、生成部12は、ステップS204に戻る。

[0124] (ステップS209)

生成部12は、多面体の全ての面に付与した番号順に面が有する辺の数を並べることで、各面の辺の数を数列化する。

[0125] (ステップS210)

生成部12は、他に数列のパターンが存在するか否かを判断する。他に数列のパターンが存在する場合(ステップS210:Yes)、生成部12は、ステップS201に戻る。この場合、生成部12は、ステップS201においては、過去に番号「1」を付与した面とは異なる任意の面に番号「1」を付与する。他に数列のパターンが存在しない場合(ステップS210:No)、生成部12は、次にステップS211を実行する。

[0126] (ステップS211)

生成部12は、1以上の数列から最小の数列を選択する。選択された数列が、多面体コードとなる。

[0127] 以下、多面体を多面体コードに変換する処理の具体例を列挙する。

[0128] 図20は、正四面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。まず、生成部12は、任意の面に「1」という番号を付与する。そして

、生成部12は、時計（左手系）回りに、「1」の面と隣接する面に、順に「2」、「3」、「4」という番号を付与する。

[0129] 図20において、番号「1」が付与された面を面<sub>1</sub>、番号「2」が付与された面を面<sub>2</sub>、番号「3」が付与された面を面<sub>3</sub>、番号「4」が付与された面を面<sub>4</sub>とする。面<sub>1</sub>は図20に示す各正四面体において右手前の面である。面<sub>1</sub>が有する3辺を時計回りに辺a、辺b、辺cと命名する。図48は、正四面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。図49は、正四面体の面<sub>1</sub>を示す図である。図49において、面<sub>1</sub>は黒色で塗りつぶされている。面<sub>2</sub>は面<sub>1</sub>と辺aを共有し、面<sub>3</sub>は面<sub>1</sub>と辺bを共有し、面<sub>4</sub>は面<sub>1</sub>と辺cを共有する。

[0130] これにより、全ての面に番号が付与されるので、生成部12は、番号順に面の辺の数を項として数列化する。つまり、面が三角形であれば3辺なので、当該面に対応する項は「3」となる。したがって、正四面体の各面を表す数列は、番号が「1」から「4」の順に「3333=3<sup>4</sup>」となる。この場合、他に数列のパターンが存在しないので、正四面体は、多面体コード「3<sup>4</sup>」に変換される。

[0131] 図21は、正八面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。まず、生成部12は、任意の面に「1」という番号を付与する。そして、生成部12は、時計（左手系）回りに、「1」の面と隣接する面に、順に「2」、「3」、「4」という番号を付与する。次に、生成部12は、「2」の面と隣接し、未だ番号が付与されていない面に「5」という番号を付与する。そして、生成部12は、「4」以下の番号が付与された面と隣接する面に、「5」の面から時計（左手系）回りに、順に「6」、「7」という番号を付与する。さらに、生成部12は、「5」の面と隣接し、未だ番号が付与されていない面に「8」という番号を付与する。

[0132] 図21において、番号「1」が付与された面を面<sub>1</sub>、～、番号「8」が付与された面を面<sub>8</sub>とする。面<sub>1</sub>は図21に示す各正八面体において右奥の面である。面<sub>1</sub>が有する3辺を時計回りにa、b、cと命名する。図50は、正八面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。面<sub>2</sub>は面<sub>1</sub>と辺aを共有し、面<sub>3</sub>は

面<sub>1</sub>と辺bを共有し、面<sub>4</sub>は面<sub>1</sub>と辺cを共有する。図5 1は、正八面体の面<sub>2</sub>を示す図である。図5 1において、面<sub>2</sub>は黒色で塗りつぶされている。図5 2は、正八面体の面<sub>5</sub>を示す図である。図5 2において、面<sub>5</sub>は黒色で塗りつぶされている。図5 3は、正八面体の面<sub>6</sub>を示す図である。図5 3において、面<sub>6</sub>は黒色で塗りつぶされている。

[0133] これにより、全ての面に番号が付与されるので、生成部1 2は、番号順に面の辺の数を項として数列化する。つまり、面が三角形であれば3辺なので、当該面に対応する項は「3」となる。したがって、正八面体の各面を表す数列は、番号が「1」から「8」の順に「3 3 3 3 3 3 3 3 = 3<sup>8</sup>」となる。この場合、他に数列のパターンが存在しないので、正八面体は、多面体コード「3<sup>8</sup>」に変換される。

[0134] 図2 2は、立方八面体から多面体コードを生成する過程の一例を示す図である。まず、生成部1 2は、任意の面に「1」という番号を付与する。そして、生成部1 2は、時計（左手系）回りに、「1」の面と隣接する面に、順に「2」、「3」、「4」という番号を付与する。次に、生成部1 2は、「2」の面と隣接し、未だ番号が付与されていない面に「5」という番号を付与する。そして、生成部1 2は、「4」以下の番号が付与された面と隣接する面に、「5」の面から時計（左手系）回りに、順に「6」、「7」、「8」、「9」、「10」という番号を付与する。さらに、生成部1 2は、「5」の面と隣接し、未だ番号が付与されていない面に「11」という番号を付与する。そして、生成部1 2は、「10」以下の番号が付与された面と隣接する面に、「11」の面から時計（左手系）回りに、順に「12」、「13」という番号を付与する。さらに、生成部1 2は、「11」の面と隣接し、未だ番号が付与されていない面に「14」という番号を付与する。

[0135] 図2 2において、番号「1」が付与された面を面<sub>1</sub>、～、番号「14」が付与された面を面<sub>14</sub>とする。面<sub>1</sub>は図2 2に示す各立方八面体において右奥の三角形の面である。面<sub>1</sub>が有する3辺を時計回りにa、b、cと命名する。図5 4は、立方八面体の面<sub>1</sub>の辺a、辺b、辺cを示す図である。面<sub>2</sub>は面<sub>1</sub>と辺a

を共有し、面<sub>3</sub>は面<sub>1</sub>と辺bを共有し、面<sub>4</sub>は面<sub>1</sub>と辺cを共有する。図55は、立方八面体の面<sub>2</sub>を示す図である。図55において、面<sub>2</sub>は黒色で塗りつぶされている。図56は、立方八面体の面<sub>6</sub>を示す図である。図56において面<sub>6</sub>は黒色で塗りつぶされている。図57は、立方八面体の面<sub>7</sub>を示す図である。図57において、面<sub>7</sub>は黒色で塗りつぶされている。

[0136] これにより、全ての面に番号が付与されるので、生成部12は、番号順に面の辺の数を項として数列化する。つまり、面が三角形であれば3辺なので、当該面に対応する項は「3」となる。また、面が四角形であれば4辺なので、当該面に対応する項は「4」となる。したがって、立方八面体の各面を表す数列は、番号が「1」から「14」の順に「34443333334443=34<sup>3</sup>3<sup>6</sup>4<sup>3</sup>3」となる。この場合、他の数列のパターンよりも当該数列が最小の数列となるので、立方八面体は、多面体コード「34<sup>3</sup>3<sup>6</sup>4<sup>3</sup>3」に変換される。

[0137] 整数Aが整数Bより小さいなら、数列Aは数列Bより小さい。上記の立方八面体の例では、最初に三角形を選択した場合には「34443333334443=34<sup>3</sup>3<sup>6</sup>4<sup>3</sup>3」の数列が得られるが、四角形を選択した場合には「43333444433334=43<sup>4</sup>4<sup>4</sup>3<sup>4</sup>4」の数列が得られる。つまり一つの多面体は複数の数列を有するため、一意に数列を定める必要がある。一例として最小の数列を選択することができる。その場合、数列43333444433334は数列34443333334443より大きいので数列34443333334443が選択される。

[0138] 以下、複数の多面体コードに基づいて、複数の多胞体コードを生成する処理について、図面を用いて具体的に説明する。図23は、多面体コードから多胞体コードを生成する過程の一例を示すフローチャートである。ここでは、取得部11は、第1情報として複数の多面体の各々の形状、及び形状ごとの個数を取得することとして説明する。

[0139] (ステップS301)

生成部12は、取得部11が取得した第1情報のうち、複数の多面体の各

々の形状、及び形状ごとの個数を取得する。

[0140] (ステップS302)

生成部12は、複数の多面体のそれぞれを多面体コードに変換することで、複数の多面体コードを準備する。

[0141] (ステップS303)

生成部12は、複数の多面体コードに基づいて、複数の多胞体コードを生成する。

[0142] 例えば、複数の多面体が、8個の正四面体と、4個の正八面体とで構成されている、と仮定する。この場合、正四面体に対応する多面体コード「 $3^4$ 」は、「 $T=3^4$ 」、正八面体に対応する多面体コード「 $3^8$ 」は「 $O=3^8$ 」で表される。したがって、生成部12は、ステップS303において、複数の多面体コードの数列「 $OOOOTTTTTTTTT$ 」を並び替えることにより、複数の多胞体コードを生成する。例えば、多胞体コードは、「 $TOOOOTTTTTTTTT=TO^4T^7$ 」である。つまり、ステップS303において、複数の多面体コード、すなわち、8つのTと4つのOに基づいて、複数の多胞体コードを生成する。複数の多胞体コードのそれぞれは、8つのTと4つのOを含む。「 $OOOOTTTTTTTTT$ 」と「 $TOOOOTTTTTTTTT$ 」は異なる多胞体コードである。

[0143] 以下、多胞体コードを3次元構造に変換する処理について、図面を用いて具体的に説明する。以下で説明する処理においては、多胞体コードが3次元構造に変換可能か否かを判定する処理も含まれる。図24は、多胞体コードから3次元構造を生成する過程の一例を示すフローチャートである。

[0144] (ステップS401)

生成部12は、多胞体コードの各項、つまり多面体コードに対応する多面体を生成する。

[0145] (ステップS402)

生成部12は、多胞体コードの項順に、多面体の各面に時計回りに番号を付与する。例えば、多胞体コードの第1項に対応する多面体に番号「1」～

「4」が付与された場合、多胞体コードの第2項に対応する多面体には、番号「5」から番号が付与される。つまり、生成部12は、各多面体で番号が重複しないように、各多面体の各面に番号を付与する。

[0146] (ステップS403)

生成部12は、未結合の最小の番号の面を有する多面体を部分多胞体に決定する。

[0147] (ステップS404)

生成部12は、部分多胞体の最小の番号の面の形状と同じ形状を有する残りの多面体の面を選択する。例えば、部分多胞体の最小の番号の面の形状が三角形であれば、残りの多面体から同じ三角形の面を選択する。ここでは、1つの面が選択される場合もあれば、複数の面が選択される場合もある。

[0148] (ステップS405)

生成部12は、選択した面のうちの最小の番号の面と、部分多胞体の未結合の最小の番号の面とを結合する。

[0149] (ステップS406)

生成部12は、部分多胞体の面と、選択した残りの多面体の面とにおいて未結合の面の組が存在するか否かを判断する。未結合の面の組がある場合(ステップS406: Yes)、生成部12は、次にステップS407を実行する。未結合の面の組が無い場合(ステップS406: No)、生成部12は、次にステップS408を実行する。

[0150] (ステップS407)

生成部12は、部分多胞体及び選択した残りの多面体の未結合の面同士を結合する。そして、生成部12は、ステップS406に戻る。

[0151] (ステップS408)

生成部12は、未結合の残りの多面体が存在するか否かを判断する。未結合の残りの多面体がある場合(ステップS408: Yes)、生成部12は、ステップS403に戻る。未結合の残りの多面体が無い場合(ステップS408: No)、生成部12は、次にステップS409を実行する。

## [0152] (ステップS409)

生成部12は、全ての多面体が100%充填できているか否か、言い換えれば、全ての多面体が隙間なく配置されているか否かを判断する。全ての多面体が100%充填できている場合（ステップS409：Yes）、生成部12の処理が完了する。この場合、生成部12は、多胞体コードを3次元構造に変換したことになる。全ての多面体が100%充填できていない場合（ステップS409：No）、生成部12は、次にステップS410を実行する。

## [0153] (ステップS410)

生成部12は、充填率が100%でない3次元構造を破棄し、処理を完了する。この場合、生成部12は、多胞体コードを3次元構造に変換しないことになる。

[0154] 以下、多面体コードを3次元構造に変換する処理の具体例を、図面を用いて説明する。図25は、多胞体コードの具体例を示す図である。図26は、多胞体コードから3次元構造を生成する過程の具体例を示す図である。図25に示すように、以下では、多胞体コード「T O O O O T T T T T T T」を3次元構造に変換する場合について説明する。

[0155] まず、生成部12は、多胞体コードにおける多面体コード「T」、「O」をそれぞれ対応する多面体に変換する。この場合、多面体コード「T」は正四面体、多面体コード「O」は正八面体である。次に、生成部12は、多胞体コードに含まれる複数の項の順に、多面体の各面に時計回りに番号を付与する。例えば、多胞体コードの最初の項（最も左の項）に対応する正四面体の各面には「1」～「4」の番号が付与され、二番目の項に対応する正八面体の各面には「5」～「10」の番号が付与される。そして、生成部12は、多胞体コードの最初の項に対応する正四面体を部分多胞体に決定する。

[0156] 次に、生成部12は、部分多胞体である正四面体の最小の番号の面の形状を有する残りの多面体の面を選択する。ここでは、部分多胞体の最小の番号の面である「1」の面の形状が三角形であり、残り全ての多面体の面の形状

が三角形であるため、残り全ての多面体の面が選択される。その後、生成部 12 は、選択した面のうちの最小の番号の面と、部分多胞体の未結合の最小の番号の面とを結合する。ここでは、部分多胞体である正四面体の「1」の面と、多胞体コードの二番目の項に対応する正八面体の「5」の面とが結合される。

[0157] 次に、生成部 12 は、部分多胞体の面と、選択した残りの多面体の面とにおいて未結合の面の組が存在するため、未結合の面同士を結合する処理を繰り返す。ここでは、生成部 12 は、部分多胞体の未結合の最小の番号である「2」の面と、選択した残りの多面体のうち未結合の最小の番号の「13」の面とを結合する。同様にして、生成部 12 は、「3」の面と「21」の面、「4」の面と「29」の面を結合する。

[0158] 次に、生成部 12 は、未結合の残りの多面体が存在するため、残りの多面体のうち未結合の最小の番号の面を有する多面体（ここでは、多胞体コードの二番目の項に対応する正八面体）を、新たな部分多胞体に決定し、上記と同様の処理を繰り返す。

[0159] そして、生成部 12 は、未結合の残りの多面体が無くなるまで上記の処理を繰り返すことにより、充填率が 100% である 3 次元構造を生成する。つまり、生成部 12 は、新部分多胞体の未結合の最小の番号である「6」の面と、選択した残りの多面体のうち未結合の最小の番号の「37」の面とを結合する。同様にして、生成部 12 は、「7」の面と「41」の面を結合し、「8」の面と「45」の面を結合し、「9」の面と「49」の面を結合し、「10」の面と「53」の面を結合し、「11」の面と「57」の面を結合し、「12」の面と「59」の面を結合する。多胞体コード「T O O O T T T T T T」の場合、生成部 12 により生成される 3 次元構造は、fcc 型の構造となる。

[0160] 以下、実施の形態 1 に係る情報処理システム 100、及び、表示部 3、第 1 記憶部 4、第 2 記憶部 5 の動作例について、図面を用いて説明する。図 27 は、実施の形態 1 に係る情報処理システム 100、及び、表示部 3、第 1

記憶部 4、第 2 記憶部 5 の動作例を示すシーケンス図である。

[0161] (ステップ S 5 0 1)

情報処理システム 1 0 0 の取得部 1 1 は、第 1 情報を取得する。ここでは、第 1 情報は、第 1 記憶部 4 に保存されている多面体データを読み出して表示部 3 に表示される第 1 画像を見ながら、ユーザが入力部 2 を用いて入力（選択）することで、取得部 1 1 に取得される。

[0162] (ステップ S 5 0 2)

情報処理システム 1 0 0 の生成部 1 2 は、取得部 1 1 が取得した第 1 情報に含まれる各多面体を多面体コードに変換する処理を実行する。

[0163] (ステップ S 5 0 3)

情報処理システム 1 0 0 の生成部 1 2 は、変換により得られた複数の多面体コードに基づいて、複数の多胞体コードを生成する処理を実行する。

[0164] (ステップ S 5 0 4)

情報処理システム 1 0 0 の生成部 1 2 は、生成した多胞体コードが 3 次元構造に変換可能か否かを判定する処理を実行する。

[0165] (ステップ S 5 0 5)

情報処理システム 1 0 0 の生成部 1 2 は、変換可能と判定した多胞体コードを 3 次元構造に変換する処理を実行する。

[0166] (ステップ S 5 0 6)

表示部 3 は、情報処理システム 1 0 0 の出力部 1 3 から出力される第 2 情報を表す第 2 画像を表示する。

[0167] (ステップ S 5 0 7)

ユーザが、表示部 3 に表示された第 2 画像を見ながら、保存したい 3 次元構造を選択すると、情報処理システム 1 0 0 は、選択した 3 次元構造に関する第 2 情報を第 2 記憶部 5 に与える。これにより、第 2 記憶部 5 は、ユーザが選択した 3 次元構造に関する第 2 情報を保存する。

[0168] 上述のように、実施の形態 1 では、互いに形状が異なる 2 種類以上の多面体を含む複数の多面体の情報を入力することで、入力した複数の多面体を組

み合わせてなる3次元構造（つまり、3次元空間での空間充填構造）を網羅的に生成することが可能となる。このため、実施の形態1では、網羅的に生成した3次元構造を用いて未知の材料の探索を行うことができるので、未知の材料の探索の効率化を図ることができる。

[0169] ところで、実施の形態1に係る情報処理システム100（情報処理方法）では、多面体を多面体コードに変換し、変換した多面体コードから多胞体コードを生成し、生成した他方体コードを3次元構造に変換しているが、これに限られない。実施の形態1に係る情報処理システム100は、多面体を多面体グラフに変換し、変換した多面体グラフから周期グラフを生成し、生成した周期グラフを3次元構造に変換してもよい。すなわち、生成部12（第2情報を生成するステップ）は、取得した第1情報を、複数の多面体をそれぞれ表す複数の多面体グラフに変換する処理と、変換した複数の多面体グラフを用いて生成された周期グラフを3次元構造に変換する処理と、を実行してもよい。

[0170] 以下、実施の形態1に係る情報処理システム100の上記動作（つまり、情報処理方法）について説明する。図28は、実施の形態1に係る情報処理システム100の他の動作例を示すフローチャートである。

[0171] （ステップS108）

取得部11は、第1情報を取得する。第1情報は、上述のように、第1記憶部4に保存されている多面体データを読み出して表示部3に表示される第1画像を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力（選択）することで、取得部11に取得される。なお、第1情報は、第1画像を参照せずに、ユーザが入力部2を用いてオリジナルのデータを入力することで、取得部11に取得されてもよい。

[0172] （ステップS109）

生成部12は、取得した第1情報に基づいて、各多面体の頂点の位置（頂点サイト）と、各多面体の中心の位置（中心サイト）とを判定する。

[0173] （ステップS110）

生成部12は、取得部11が取得した第1情報を、複数の多面体をそれぞれ表す複数の多面体グラフに変換する処理を実行する。ここでは、生成部12は、第1情報に含まれる各多面体を多面体グラフに変換する。

[0174] (ステップS111)

生成部12は、変換した多面体グラフを用いて周期グラフを生成する処理を実行する。ここでは、生成部12は、変換により得られた複数の多面体グラフの組み合わせに基づいて、複数の周期グラフを生成する。

[0175] (ステップS112)

生成部12は、生成した周期グラフが3次元構造に変換可能か否かを判定する。生成部12は、例えば、互いに接する2つの多面体の面が同じか否か、複数の多面体が隙間なく配置されたか否か（言い換えれば、充填率が100%か否か）により、周期グラフの3次元構造への変換の可否を判定できる。変換が可能であると判定した場合（ステップS112：Yes）、生成部12は、次にステップS113を実行する。変換が不可能であると判定した場合（ステップS112：No）、生成部12は、次にステップS114を実行する。

[0176] (ステップS113)

生成部12は、周期グラフを3次元構造に変換する処理を実行する。変換処理には、例えば、上述の小谷・砂田理論（Kotani-Sunada, 2000, Trans. Amer. Mat）に示される手法を用いることが可能である。生成部12は、次にステップS114を実行する。

[0177] (ステップS114)

生成部12は、変換可能であるか否かを未だ判定していない周期グラフが存在するか否かを判断する。未だ判定していない周期グラフがある場合（S114：Yes）、生成部12は、ステップS112に戻る。全ての周期グラフについて判定した場合（S114：No）、生成部12の処理が完了する。そして、情報処理システム100（情報処理方法）は、次にステップS115を実行する。

[0178] (ステップS 1 1 5)

出力部 1 3 は、生成部 1 2 が生成した第 2 情報を出力する処理を実行する。ここでは、出力部 1 3 は、生成部 1 2 が生成した第 2 情報を表す第 2 画像を表示部 3 に表示させることで、第 2 情報を出力する。

[0179] 表示部 3 は表示制御部 3 0 を含んでもよい。表示制御部 3 0 を含む表示部 3 を表示部 3 A と呼んでもよい。出力部 1 3 は、生成部 1 2 が生成した第 2 情報を、表示部 3 A に出力してもよい。これにより、表示部 3 A は第 2 情報を表示してもよい。つまり、出力部 1 3 は、表示部 3 A に第 2 情報を表示させてもよい。

[0180] 以下、多面体から 3 次元構造を生成する処理の具体例について図面を用いて説明する。図 2 9 は、多面体を多面体グラフに変換する過程の具体例を示す図である。図 3 0 は、周期グラフを 3 次元構造に変換する場合の具体例を示す図である。

[0181] まず、生成部 1 2 は、多面体の各頂点サイトと、多面体の中心サイトと、を判定する。図 2 9 の (a) に示す正四面体の場合、生成部 1 2 は、図 2 9 の (b) に示すように 4 つの頂点サイト及び 1 つの中心サイトを判定する。また、図 2 9 の (d) に示す正八面体の場合、生成部 1 2 は、図 2 9 の (e) に示すように 6 つの頂点サイト及び 1 つの頂点サイトを判定する。

[0182] 次に、生成部 1 2 は、多面体の各頂点サイトと中心サイトとを繋ぐようにして、多面体グラフを生成する。多面体が正四面体の場合、生成部 1 2 は、図 2 9 の (c) に示すように、中心ノードから 4 つの頂点ノードのそれぞれにエッジが伸びた多面体グラフを生成する。また、多面体が正八面体の場合、生成部 1 2 は、図 2 9 の (f) に示すように、中心ノードから 6 つの頂点ノードのそれぞれにエッジが伸びた多面体グラフを生成する。

[0183] 次に、生成部 1 2 は、生成した多面体グラフにおける各頂点ノードを結合することで、周期グラフを生成する。図 3 0 の (a) に示す周期グラフは、2 つの正四面体に対応する 2 つの多面体グラフと、1 つの正八面体に対応する 1 つの多面体グラフと、から生成された周期グラフを示す。この周期グラ

フは、各多面体グラフの頂点ノードが1つに結合することで生成される。そして、生成部12は、生成した周期グラフを3次元構造に変換する。図30の(b)に示す3次元構造(fcc型の構造)は、図30の(a)に示す周期グラフを変換することにより生成される。

[0184] (実施の形態2)

以下、本開示の実施の形態2に係る情報処理システム200(情報処理方法、又はプログラム)について、図面を用いて詳細に説明する。実施の形態2に係る情報処理システム200は、取得部11が第1情報として材料の組成に関する材料情報を取得する点で、実施の形態1に係る情報処理システム100と相違する。なお、実施の形態2に係る情報処理システム200は、実施の形態1に係る情報処理システム100と同様に、取得部11と、生成部12と、出力部13と、を備えており、構成が共通であるため、これらの説明を省略する。

[0185] [使用例]

以下、実施の形態2に係る情報処理システム200の使用例を列挙する。以下では、第2使用例の説明においては、第1使用例と共通する点についての説明を省略する。

[0186] 図31、図32、及び図33は、いずれも実施の形態2の第1使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図31の(a)及び図31の(b)は、いずれも表示部3に最初に表示される第1画像の一例を表している。表示部3は、図31の(a)に示す第1画像を表示してもよいし、図31の(b)に示す第1画像を表示してもよい。

[0187] 図31の(a)に示す第1画像は、元素を選択するための元素選択領域と、「次へ」という実行アイコンと、を含んでいる。元素選択領域には、周期表が表示されている。ユーザは、元素選択領域において所望の材料に含有される元素(原子)を選択する。ここで、例えば、ユーザが同一の元素に対して選択する操作を1回行った場合、当該元素は、多面体の中心に配置される元素となる。一方、ユーザが同一の元素に対して選択する操作を2回行った

場合、当該元素は、多面体の頂点に配置される元素となる。そして、ユーザが実行アイコンを選択すると、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、材料の組成（ここでは、材料に含有される原子）に関する材料情報を取得することになる。

[0188] 図31の(b)に示す第1画像は、材料の組成を指定するための組成指定領域と、「次へ」という実行アイコンと、を含んでいる。組成指定領域には、ユーザが所望する材料の組成を指定するためのテキストボックスが表示されている。ユーザは、テキストボックスに所望の材料の組成式を入力する。そして、ユーザが実行アイコンを選択すると、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、材料の組成（ここでは、材料の組成自体）に関する材料情報を取得することになる。なお、図31の(b)に示す組成式においては、下付き文字による表現を省略している。

[0189] 図32は、表示部3に2番目に表示される第1画像の一例を表している。図32に示す第1画像は、図31の(a)に示す第1画像、又は図31の(b)に示す第1画像において、ユーザが実行アイコンを選択した場合に、表示部3に表示される。図32に示す第1画像は、材料に含まれる元素（原子）の配置を指定するための配置指定領域と、「次へ」という実行アイコンと、が表示されている。配置指定領域には、多面体における各元素の数と、各元素の多面体における位置（頂点又は中心）とを示す表が表示される。

[0190] ここで、図31の(a)に示す第1画像を経て、図32に示す第1画像が表示部3に表示される場合、配置指定領域においては、各元素の位置が既に指定されていることになる。したがって、ユーザは、多面体における各元素の数を指定し、実行アイコンを選択する。この場合、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、第1情報として、3次元構造における元素（原子）の配置に関する配置情報を取得することになる。

[0191] 一方、図31の(b)に示す第1画像を経て、図32に示す第1画像が表示部3に表示される場合、配置指定領域においては、各元素の数が既に指定されていることになる。したがって、ユーザは、多面体における各元素の配

置を指定し、実行アイコンを選択する。この場合も、取得部 11 は（第 1 情報を取得するステップでは）、第 1 情報として、3 次元構造における元素（原子）の配置に関する配置情報を取得することになる。

[0192] 図 33 は、表示部 3 に 3 番目に表示される第 1 画像の一例を表している。図 33 に示す第 1 画像は、図 32 に示す第 1 画像において、ユーザが実行アイコンを選択した場合に、表示部 3 に表示される。図 33 に示す第 1 画像は、多面体の組み合わせを選択するための組み合わせ選択領域と、歪度指定領域と、「3 次元構造を生成」という実行アイコンと、を含んでいる。なお、図 33 に示す第 1 画像は、歪度指定領域の代わりに、例えば単位構造選択領域を含んでもよい。つまり、図 33 に示す第 1 画像には、組み合わせ選択領域を除いて、実施の形態 1 の第 1 使用例～第 5 使用例のいずれか 1 つ、又はこれらの組み合わせが適用されてもよい。

[0193] 組み合わせ選択領域には、配置情報に基づくユーザが選択可能な複数の多面体の組み合わせと、複数の多面体の組み合わせにそれぞれ対応する複数の選択用のボタンと、が表示されている。なお、組み合わせ選択領域においては、各多面体の形状の名称が表示されていてもよい。また、組み合わせ選択領域においては、各多面体は、静止画像ではなく、動画像により表示されていてもよい。ユーザは、組み合わせ選択領域において 3 次元構造に含めたい多面体の組み合わせを選択する。これにより、取得部 11 は（第 1 情報を取得するステップでは）、第 1 情報として、複数の多面体の各々の形状を示す形状情報と、形状ごとの構成比を示す構成比情報と、を取得することになる。

[0194] そして、ユーザが実行アイコンを選択すると下記の処理が実行される。

[0195] 生成部 12 は、構成比情報に基づいて、複数の多面体の形状ごとの数を示す個数情報を決定する。当該個数情報は複数の個数情報であってもよい。例えば、図 33 で正四面体の数：正八面体の数 = 2 : 1 を示す情報が選択されたとする。複数の個数情報は、（正四面体の数は 2 個、正八面体の数は 1 個）、（正四面体の数は 4 個、正八面体の数は 2 個）、・・・、（正四面体の

数は  $2 \times n$  個、正八面体の数は  $1 \times n$  個) を示す情報であってもよい。  $n$  は 2 以上の自然数、かつ、予め定められた値であってもよい。複数の個数情報のそれぞれに対して下記の処理が実行されてもよい。

[0196] 生成部 1 2 は (第 2 情報を生成するステップでは)、形状情報が示す形状の複数の多面体のそれぞれを当該多面体に対応する数だけ隙間なく配置させた 3 次元構造に関する第 2 情報を生成する。言い換えれば、生成部 1 2 は、形状情報が示す形状の複数の多面体を、構成比情報が示す形状ごとの構成比で隙間なく配置させた 3 次元構造に関する第 2 情報を生成する。ここで、上記の形状情報及び構成比情報は、配置情報に基づく情報である。したがって、生成部 1 2 は (第 2 情報を生成するステップでは)、配置情報が示す元素 (原子) の配置に基づいて 3 次元構造に関する第 2 情報を生成している、と言える。

[0197] その後、実施の形態 1 の第 1 使用例と同様に、表示部 3 には第 2 画像が表示される。そして、ユーザが保存したい 3 次元構造、及び 3 次元構造の保存形式を選択することで、ユーザが選択した 3 次元構造に関する第 2 情報が第 2 記憶部 5 に保存される。

[0198] 以下、実施の形態 2 に係る情報処理システム 200、及び、表示部 3、第 1 記憶部 4、第 2 記憶部 5 の第 1 動作例について、図面を用いて説明する。図 3 4 は、実施の形態 2 に係る情報処理システム 200、及び、表示部 3、第 1 記憶部 4、第 2 記憶部 5 を含む全体の第 1 動作例を示すシーケンス図である。

[0199] (ステップ S 6 0 1)

情報処理システム 200 の取得部 1 1 は、材料情報及び配置情報を取得する。ここでは、材料情報は、表示部 3 に最初に表示される第 1 画像 (図 3 1 参照) を見ながら、ユーザが入力部 2 を用いて入力 (選択) することで、取得部 1 1 に取得される。また、配置情報は、表示部 3 に 2 番目に表示される第 1 画像 (図 3 2 参照) を見ながら、ユーザが入力部 2 を用いて入力 (選択) することで、取得部 1 1 に取得される。

[0200] (ステップS602)

情報処理システム200の取得部11は、配置情報に基づくユーザが選択可能な複数の多面体の組み合わせを探索する。複数の多面体の組み合わせを探索する際に、取得部11は、第1記憶部4に保存されている多面体データを読み出して参照する。

[0201] (ステップS603)

表示部3は、情報処理システム200の出力部13から出力される複数の多面体の組み合わせを表示する。言い換えれば、表示部3は、多面体の組み合わせを選択するための組み合わせ選択領域を含む第1画像を表示する。

[0202] (ステップS604)

情報処理システム200の取得部11は、第1情報を取得する。ここでは、第1情報は、形状情報及び構成比情報であって、表示部3に3番目に表示される第1画像(図33参照)を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力(選択)することで、取得部11に取得される。

[0203] (ステップS605)

情報処理システム200の生成部12は、変換可能と判定した多胞体コードを3次元構造に変換する処理を実行する。なお、ステップS605は、ステップS505(図27参照)と同じ処理である。また、ステップS604とステップS605との間においては、ステップS502~ステップS504(図27参照)と同じ処理が実行される。

[0204] (ステップS606)

表示部3は、情報処理システム200の出力部13から出力される第2情報を表す第2画像を表示する。

[0205] (ステップS607)

ユーザが、表示部3に表示された第2画像を見ながら、保存したい3次元構造を選択すると、情報処理システム200は、選択した3次元構造に関する第2情報を第2記憶部5に与える。これにより、第2記憶部5は、ユーザが選択した3次元構造に関する第2情報を保存する。

[0206] 図35及び図36は、いずれも実施の形態2の第2使用例において表示部3に表示される画像を示す図である。図35は、表示部3に2番目に表示される第1画像の一例を表している。第2使用例では、表示部3には、図32に示す第1画像の代わりに、図35に示す第1画像が表示される。図35に示す第1画像は、図32に示す第1画像とは異なり、「次へ」という実行アイコンの代わりに、多面体情報の入力を行うための「する」という第1実行アイコンと、多面体情報の入力を行わないための「しない」という実行アイコンと、を含んでいる。

[0207] 図35に示す第1画像において、ユーザが第1実行アイコンを選択した場合、表示部3には、例えば実施の形態1の第1使用例～第5使用例のいずれか1つ、又はこれらを組み合わせた、多面体情報の入力を促す第1画像（図8の(a)、図11、図13、図14、及び図15の(a)参照）が表示される。したがって、ユーザが表示部3に表示される第1画像を見ながら多面体情報を入力（選択）することで、取得部11は（第1情報を取得するステップでは）、多面体情報（第1情報）を取得することになる。そして、ユーザが実行アイコンを選択することで、生成部12（第2情報を生成するステップでは）、3次元構造としての材料の組成がとり得る結晶構造に関する第2情報を生成する。この場合、生成部12は、材料情報及び配置情報のみならず、多面体情報に更に基づいて第2情報を生成することになる。

[0208] 一方、図35に示す第1画像において、ユーザが第2実行アイコンを選択した場合においても、生成部12（第2情報を生成するステップでは）、3次元構造としての材料の組成がとり得る結晶構造に関する第2情報を生成する。この場合、生成部12は、材料情報及び配置情報に基づいて第2情報を生成することになる。

[0209] 図36は、表示部3に表示される第2画像の一例を表している。第2画像は、生成部12が3次元構造（ここでは、結晶構造）に関する第2情報を生成した後に、表示部3に表示される。第2画像は、生成部12が生成した結晶構造の一覧と、「選択した結晶構造をエクスポート」という実行アイコン

と、を含む。

[0210] ユーザは、保存したい結晶構造を選択し、実行アイコンを選択する。その後、ユーザは、実施の形態1と同様に、所望の保存形式を選択することで、ユーザが選択した結晶構造に関する第2情報が第2記憶部5に保存される。

[0211] 以下、実施の形態2に係る情報処理システム200を含む全体の第2動作例について、図面を用いて説明する。図37は、実施の形態2に係る情報処理システム200、及び、表示部3、第1記憶部4、第2記憶部5の第2動作例を示すシーケンス図である。ここでは、ユーザが多面体情報を入力することとして説明する。

[0212] (ステップS701)

情報処理システム200の取得部11は、材料情報及び配置情報を取得する。ここでは、材料情報は、表示部3に最初に表示される第1画像(図31参照)を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力(選択)することで、取得部11に取得される。また、配置情報は、表示部3に2番目に表示される第1画像(図32参照)を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力(選択)することで、取得部11に取得される。

[0213] (ステップS702)

情報処理システム200の取得部11は、第1情報を取得する。ここでは、第1情報は、多面体情報であって、表示部3に表示される第1画像を見ながら、ユーザが入力部2を用いて入力(選択)することで、取得部11に取得される。

[0214] (ステップS703)

情報処理システム200の生成部12は、変換可能と判定した多胞体コードを3次元構造に変換する処理を実行する。なお、ステップS703は、ステップS505(図27参照)と同じ処理である。また、ステップS702とステップS703との間においては、ステップS502~ステップS504(図27参照)と同じ処理が実行される。

[0215] (ステップS704)

情報処理システム200の生成部12は、生成した3次元構造ごとに複数の配置パターン候補を生成する。配置パターン候補は、3次元構造に含まれる各多面体の各頂点及び中心に配置される元素（原子）のパターンの候補である。なお、配置パターン候補は、多面体の中心に元素を配置しないというパターンも含み得る。

[0216] (ステップS705)

情報処理システム200の生成部12は、配置パターン候補ごとに結晶構造を生成する。具体的には、生成部12は、配置パターン候補に従って各多面体の各頂点及び中心に元素（原子）を配置することにより、結晶構造を生成する。

[0217] (ステップS706)

表示部3は、情報処理システム200の出力部13から出力される、結晶構造に関する第2情報を表す第2画像を表示する。

[0218] (ステップS707)

ユーザが、表示部3に表示された第2画像を見ながら、保存したい結晶構造を選択すると、情報処理システム200は、選択した結晶構造に関する第2情報を第2記憶部5に与える。これにより、第2記憶部5は、ユーザが選択した結晶構造に関する第2情報を保存する。

[0219] 上述のように、実施の形態2では、材料の組成に関する材料情報を入力することで、入力した材料情報に基づく複数の多面体を組み合わせてなる3次元構造（つまり、3次元空間での空間充填構造）を網羅的に生成することが可能となる。このため、実施の形態2では、ユーザが探索したい材料についての3次元構造を生成することができる。

[0220] (実施の形態3)

以下、本開示の実施の形態3に係る情報処理システム300（情報処理方法、又はプログラム）について、図面を用いて詳細に説明する。図38は、実施の形態3に係る情報処理システム300を含む全体構成を示すブロック図である。実施の形態3に係る情報処理システム300は、取得部11が3

次元構造の用途に関する第3情報を更に取得する点で、実施の形態1に係る情報処理システム100と相違する。また、実施の形態3に係る情報処理システム300は、第3記憶部6が更に接続されている点で、実施の形態1に係る情報処理システム100と相違する。なお、実施の形態3に係る情報処理システム300は、実施の形態1に係る情報処理システム100と同様に、取得部11と、生成部12と、出力部13と、を備えており、構成が共通であるため、これらの説明を省略する。

[0221] 第3記憶部6は、3次元構造の用途に関する用途データベースを格納するための記録媒体である。記録媒体は、例えば、ハードディスクドライブ、RAM (Random Access Memory)、ROM (Read Only Memory)、又は半導体メモリ等である。なお、このような記録媒体は、揮発性であっても不揮発性であってもよい。

[0222] 用途データベースには、例えば建築、装飾品、インテリア、玩具、都市設計、収納、又は食等の用途についてのデータが含まれ得る。

[0223] 建築についてのデータには、例えば建築物の骨格強度化若しくは軽量化、宇宙空間若しくはメタバース（仮想空間）における建築物の設計、又はモニュメント等の建築物全般に関するデータが含まれ得る。また、建築の用途についての情報には、例えば建築基準等の法規制に関するデータ、建材の物性に関するデータ、土地若しくは空間に関するデータ、住人に関するデータ、メタバースでのルールに関するデータ、又は予算に関するデータ等が含まれ得る。

[0224] 装飾品についてのデータには、例えばペンダント、イヤリング、又は指輪等の装飾品の態様に関するデータが含まれ得る。また、装飾品の用途についての情報には、装飾品の材質の物性に関するデータ、又はサイズに関するデータ等が含まれ得る。

[0225] インテリアの用途についてのデータには、例えば棚、照明器具、又はモニュメント等のインテリアの態様に関するデータが含まれ得る。また、インテリアの用途についての情報には、インテリアの材質の物性に関するデータ、

サイズに関するデータ、又は重量限界に関するデータ等が含まれ得る。

[0226] 玩具についてのデータには、例えば組立ブロック、又はパズル等の玩具の態様に関するデータが含まれ得る。また、玩具の用途についての情報には、例えば玩具の材質の物性に関するデータ、対象年齢に関するデータ、利用者の手のサイズに関するデータ、又は玩具の難易度に関するデータ等が含まれ得る。

[0227] 都市設計についてのデータには、例えば空における道、宇宙空間における道、又はメタバースにおける道等の道路設計に関するデータが含まれ得る。また、都市設計の用途についてのデータには、例えば空間の境界等の区割りに関するデータが含まれ得る。また、都市設計の用途についてのデータには、例えばドローンの配置、又はメタバースにおける店舗の配置等の配置に関するデータが含まれ得る。また、都市設計の用途についてのデータには、例えば住人、地形、気候、若しくは文化に関するデータ、インフラ（上下水道、電気、若しくはガス等）に関するデータ、エリア（商業エリア、住宅エリア、若しくは工業エリア）に関するデータ、予算に関するデータ、ドローンに関するデータ、店舗に関するデータ、若しくは法規制等に関するデータ等が含まれ得る。

[0228] 収納についてのデータには、例えば収納用の容器に充填率100%で収納可能な態様に関するデータが含まれ得る。また、収納の用途についてのデータには、例えば容器若しくは内容物の材質の物性に関するデータ、容器のサイズに関するデータ、又は内容物（割れ物、若しくは天地無用等）に関するデータ等が含まれ得る。

[0229] 食についてのデータには、例えばケーキ等の料理の態様に関するデータが含まれ得る。また、食の用途についてのデータには、例えば料理に含まれる食材の材質の物性に関するデータ、サイズに関するデータ等が含まれ得る。

[0230] [使用例]

以下、実施の形態3に係る情報処理システム300の使用例について説明する。図39は、実施の形態3の使用例1において表示部3に表示される画

像を示す図である。図39は、表示部3に表示される第1画像及び第3画像の一例を表している。

[0231] 第1画像は、形状選択領域と、個数指定領域と、単位構造選択領域と、「3次元構造を生成」という実行アイコンと、を含んでいる。なお、第1画像は、形状選択領域を含んでいればよく、個数指定領域及び単位構造選択領域は必須ではない。また、第1画像は、個数指定領域、単位構造選択領域、対称性指定領域、構成比指定領域、及び歪度指定領域のうちの少なくとも1つを含んでいてもよい。

[0232] 第3画像は、3次元構造の用途を選択するための用途選択領域を含んでいる。用途選択領域には、ユーザが選択可能な複数の用途の名称と、複数の用途にそれぞれ対応する複数の選択用ボタンと、が表示されている。なお、用途選択領域においては、各用途の名称と共に、各用途のイメージ画像が表示されていてもよい。

[0233] ユーザは、用途選択領域において3次元構造の用途を選択する。これにより、取得部11は（第3情報を取得するステップでは）、3次元構造の用途に関する第3情報を取得することになる。この場合、ユーザが実行アイコンを選択すると、生成部12は（第2情報を生成するステップでは）、第3情報が示す用途に基づく情報を付与した3次元構造に関する第2情報を生成する。

[0234] 図39に示す例では、ユーザは、3次元構造の用途として「材料」を選択している。したがって、この場合、生成部12は、材料についての3次元構造、つまり結晶構造に関する第2情報を生成する。

[0235] ここで、第3画像は、3次元構造の用途についての詳細な情報を入力するための詳細入力画像を更に含んでいてもよい。例えば、詳細入力画像は、ユーザが用途選択領域にて3次元構造の用途を選択した場合に、表示部3に表示される。詳細入力画像には、ユーザが選択した用途についての詳細な情報を入力するための領域が含まれる。詳細入力画像は、第3記憶部6に保存されている、ユーザが指定した用途に対応するデータを読み出すことで、出力

部 1 3 により表示部 3 に表示される。

[0236] ユーザが詳細入力画像にて詳細情報を入力することで、取得部 1 1（第 3 情報を生成するステップでは）、3次元構造の用途についての詳細情報を更に取得することになる。この場合、生成部 1 2 は（第 2 情報を生成するステップでは）、第 3 情報が示す用途に基づく情報として、詳細情報を更に付与した 3次元構造に関する第 2 情報を生成する。

[0237] 例えば、ユーザが 3次元構造の用途として「材料」を選択した場合、詳細入力画像には、実施の形態 2 における元素選択領域又は組成指定領域と、配置指定領域と、が含まれる。この場合、ユーザが元素選択領域又は組成指定領域と、配置指定領域との各々で入力することにより、生成部 1 2 で生成される材料についての 3次元構造（つまり、結晶構造）に含まれる元素（原子）の種類と、元素の配置とを指定することが可能である。

[0238] ここで、図 3 9 に示す例では、第 1 画像及び第 3 画像を同時に表示部 3 に表示しているが、これに限られない。例えば、第 3 画像は、第 1 画像とは別に表示されてもよい。具体的には、第 3 画像は、第 1 画像が表示部 3 に表示される前に表示されてもよいし、第 1 画像が表示部 3 に表示された後に表示されてもよい。

[0239] 以下、生成部 1 2 が生成する 3次元構造の用途ごとの例について列挙する。以下に示す例は、ユーザが用途選択領域にて 3次元構造の用途を選択し、かつ、詳細入力画像にて指定した用途の詳細情報を入力した場合に生成部 1 2 が生成する 3次元構造の例である。

[0240] 図 4 0 は、建築物に関する 3次元構造の一例を示す図である。図 4 0 に示す 3次元構造は、宇宙空間又はメタバースにおける集合住宅等の住宅施設を示している。図 4 0 に示す例では、各多面体が居住空間となっている。

[0241] 図 4 1 は、装飾品に関する 3次元構造の一例を示す図である。図 4 1 に示す 3次元構造は、ペンダントの構造を示している。

[0242] 図 4 2 は、インテリアに関する 3次元構造の一例を示す図である。図 4 2 に示す 3次元構造は、照明器具の器具本体の構造を示している。

- [0243] 図43は、玩具に関する3次元構造の一例を示す図である。図43に示す3次元構造は、組立ブロックの構造を示している。図43における最も左側の画像は、組立ブロックの完成図の一例を表しており、図43における右側の3つの画像は、組立ブロックに含まれるブロックの一例を表している。
- [0244] 図44は、都市設計に関する3次元構造の一例を示す図である。図44の(a)に示す3次元構造は、宇宙空間における宇宙船の航路を示している。図44の(a)において、各多面体の辺は、宇宙船の航路を表しており、各多面体の中心は、宇宙船が発着する惑星等を表している。図44の(b)に示す3次元構造は、ドローンの移動経路を示している。図44の(b)において、各多面体の辺は、ドローンの移動経路を表しており、各多面体の頂点は、ドローンの発着地点を表している。
- [0245] 図45は、収納に関する3次元構造の一例を示す図である。図45に示す3次元構造は、立方体形状の段ボール箱(容器)に充填率100%で収納可能な構造を示している。図45において、各多面体は、段ボール箱に収納する物品を表している。
- [0246] 図46は、食に関する3次元構造の一例を示す図である。図46に示す3次元構造は、ケーキの構造、言い換えればケーキのデザインを表している。
- [0247] 図47は、材料に関する3次元構造の一例を示す図である。図47に示す3次元構造は、結晶構造である。なお、図47に示す例では、3次元構造は、ユーザが装着しているVR(Virtual Reality)用のヘッドマウントディスプレイを通してユーザが視認可能な仮想空間に表示されている。したがって、ユーザは、仮想空間上の結晶構造を見ながら、VR用のコントローラを用いて結晶構造を編集することが可能である。
- [0248] 上述のように、実施の形態3では、3次元構造の用途に関する第3情報を入力することで、入力した用途に応じた3次元構造(つまり、3次元空間での空間充填構造)を網羅的に生成することが可能である。このため、実施の形態3では、ユーザの所望の用途に応じた3次元構造を生成することができる。

## [0249] (変形例)

以上、本開示の1つ又は複数の態様に係る情報処理システム（情報処理方法）について、各実施の形態に基づいて説明したが、本開示は、それらの実施の形態に限定されるものではない。本開示の趣旨を逸脱しない限り、当業者が思いつく各種変形を上記各実施の形態に施したものも本開示に含まれてもよい。また、複数の互いに異なる実施の形態における構成要素を組み合わせで構築される形態も本開示に含まれてもよい。

[0250] 例えば、上記各実施の形態では、第2情報は、3次元構造自体を示す情報であるが、これに限られない。例えば、第2情報は、3次元構造を示す情報、3次元構造を表す数列（例えば、多胞体コード）を示す情報、及び3次元構造を表す周期グラフを示す情報のうちの少なくとも1つを含んでいればよい。

[0251] 例えば、上記各実施の形態では、情報処理システム100、200、300は、第1画像又は第2画像を表示部3に表示させるが、これに限られない。例えば、情報処理システム100、200、300は、第1画像又は第2画像自体を表示部3に表示させずに、これらの画像に含まれる情報を出力してもよい。同様に、情報処理システム300は、第3画像自体を表示部3に表示させずに、当該画像に含まれる情報を出力してもよい。

[0252] また、上記各実施の形態では、情報処理システム100、200、300の取得部11は、入力部2でユーザが入力した第1情報を取得しているが、これに限られない。例えば、取得部11は、ユーザの入力を受けずに、第1記憶部4に記憶されている情報を読み出して第1情報を取得してもよい。

[0253] また、上記各実施の形態では、第1記憶部4と第2記憶部5とは、互いに異なる記録媒体により実現されているが、これに限られない。例えば、第1記憶部4と第2記憶部5とは、同一の記録媒体により実現されていてもよい。同様に、実施の形態3では、第1記憶部4、第2記憶部5、及び第3記憶部6は、同一の記録媒体により実現されてもよい。

[0254] また、上記各実施の形態では、情報処理システム100、200、300

の各々は、取得部11と、生成部12と、出力部13と、で構成されているが、これに限られない。例えば、情報処理システム100は、図5の「100A」で示されるように、表示制御部30と、表示部3を含んでもよい。。また、情報処理システム300は、図38の「300A」で示されるように、表示制御部30と、表示部3を含んでもよい。情報処理システム200も同様に、表示制御部30と、表示部3を含んでもよい。

[0255] なお、上記各実施の形態において、各構成要素は、専用のハードウェアで構成されるか、各構成要素に適したソフトウェアプログラムを実行することによって実現されてもよい。各構成要素は、CPU (Central Processing Unit) 又はプロセッサなどのプログラム実行部が、ハードディスク又は半導体メモリなどの記録媒体に記録されたソフトウェアプログラムを読み出して実行することによって実現されてもよい。

[0256] なお、以下のような場合も本開示に含まれる。

[0257] (1) 上記の少なくとも1つの装置は、具体的には、マイクロプロセッサ、ROM (Read Only Memory)、RAM (Random Access Memory)、ハードディスクユニット、ディスプレイユニット、キーボード、マウスなどから構成されるコンピュータシステムである。そのRAM又はハードディスクユニットには、コンピュータプログラムが記憶されている。マイクロプロセッサが、コンピュータプログラムにしたがって動作することにより、上記の少なくとも1つの装置は、その機能を達成する。ここでコンピュータプログラムは、所定の機能を達成するために、コンピュータに対する指令を示す命令コードが複数個組み合わせられて構成されたものである。

[0258] (2) 上記の少なくとも1つの装置を構成する構成要素の一部又は全部は、1個のシステムLSI (Large Scale Integration: 大規模集積回路) から構成されているとしてもよい。システムLSIは、複数の構成部を1個のチップ上に集積して製造された超多機能LSIであり、具体的には、マイクロプロセッサ、ROM、RAMなどを含んで構成さ

れるコンピュータシステムである。上記RAMには、コンピュータプログラムが記憶されている。マイクロプロセッサが、コンピュータプログラムにしたがって動作することにより、システムLSIは、その機能を達成する。

[0259] (3) 上記の少なくとも1つの装置を構成する構成要素の一部又は全部は、その装置に脱着可能なICカード又は単体のモジュールから構成されているとしてもよい。ICカード又はモジュールは、マイクロプロセッサ、ROM、RAMなどから構成されるコンピュータシステムである。ICカード又はモジュールは、上記の超多機能LSIを含むとしてもよい。マイクロプロセッサが、コンピュータプログラムにしたがって動作することにより、ICカード又はモジュールは、その機能を達成する。このICカード又はこのモジュールは、耐タンパ性を有するとしてもよい。

[0260] (4) 本開示は、上記に示す方法であるとしてもよい。また、これらの方法をコンピュータにより実現するコンピュータプログラムであるとしてもよいし、コンピュータプログラムからなるデジタル信号であるとしてもよい。

[0261] また、本開示は、コンピュータプログラム又はデジタル信号をコンピュータ読み取り可能な記録媒体、例えば、フレキシブルディスク、ハードディスク、CD (Compact Disc) -ROM、DVD、DVD-ROM、DVD-RAM、BD (Blu-ray (登録商標) Disc)、半導体メモリなどに記録したものとしてもよい。また、これらの記録媒体に記録されているデジタル信号であるとしてもよい。

[0262] また、本開示は、コンピュータプログラム又はデジタル信号を、電気通信回線、無線又は有線通信回線、インターネットを代表とするネットワーク、データ放送等を経由して伝送するものとしてもよい。

[0263] また、プログラム又はデジタル信号を記録媒体に記録して移送することにより、又はプログラム又はデジタル信号をネットワーク等を経由して移送することにより、独立した他のコンピュータシステムにより実施するとしてもよい。

[0264] (その他)

本開示の実施形態の変形例は下記に示すようなものであってもよい。

[0265] 一又は複数のメモリに記録された複数の命令を実行する一又は複数のプロセッサによって実行される方法 (a method being performed by one or more processors configured to execute instructions stored in one or more memories) であって、前記方法は、

第 1 多面体の形状の第 1 情報、～、第 n 多面体の形状の第 n 情報を含む形状情報を受け取り、前記 n は 1 以上の整数であり、

前記第 1 多面体に対応する第 1 の数、～、前記第 n 多面体に対応する第 n の数を含む数情報を受け取り、これにより、前記第 1 多面体及び前記第 1 の数に対応する一又は複数の第 1 多面体、～、前記第 n 多面体及び前記第 n の数の対応する一又は複数の第 n 多面体が決定され、

一又は複数の第 1 コード、～、一又は複数の第 n コードを含む複数のコードを並び替え、これにより、複数の多胞体コードを決定し、(例えば、図 23 参照) 前記一又は複数の第 1 コードは、前記第 1 の数と前記第 1 多面体に対する第 1 コードに対応し、～、前記一又は複数の第 n コードは、前記第 n の数と前記第 n 多面体に対する第 n コードに対応し、前記第 1 コードは前記第 1 多面体に含まれる複数の面それぞれの複数の辺の数に基づいて決定され、～、前記第 n コードは前記第 n 多面体に含まれる複数の面それぞれの複数の辺の数に基づいて決定され、(例えば、図 20、図 21、図 22 参照)

前記複数の多胞体コードに基づいて、前記一又は複数の第 1 多面体、～、前記一又は複数の第 n 多面体を含む 3 次元構造を決定し、(例えば、図 24 参照)

前記 3 次元構造の画像及び前記 3 次元構造に含まれる複数の 3 次元座標を含む第 2 情報を生成し、

前記画像及び前記第 2 情報を出し、を含み、

前記 3 次元構造は前記一又は複数の第 1 多面体、～、前記一又は複数の第 n 多面体以外の一又は複数の多面体を含まず、

前記一又は複数の第 1 多面体、～、前記一又は複数の第 n 多面体から任意

に選択された2つの多面体は重ならず、

前記3次元構造に含まれる複数の位置は、結晶構造が含む複数の原子の複数の位置に対応する。

### 産業上の利用可能性

[0266] 本開示は、未知の材料を探索する場合に有用である。

### 符号の説明

- [0267] 1 1 取得部  
1 2 生成部  
1 3 出力部  
2 入力部  
3 表示部  
3 0 表示制御部  
4 第1記憶部  
5 第2記憶部  
6 第3記憶部  
1 0 0, 2 0 0, 3 0 0 情報処理システム  
1 0 0 A, 3 0 0 A 情報処理システム

## 請求の範囲

- [請求項1] コンピュータが実行する情報処理方法であって、  
互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得するステップと、  
前記第1情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップと、  
生成した前記第2情報を出力するステップと、を含み、  
前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である、  
情報処理方法。
- [請求項2] 前記第2情報は、前記3次元構造を示す情報、前記3次元構造を表す数字若しくは文字を含む数列を示す情報、及び前記3次元構造を表す周期グラフを示す情報のうちの少なくとも1つを含む、  
請求項1に記載の情報処理方法。
- [請求項3] 前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の各々の形状を示す形状情報を取得し、  
前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成する、  
請求項1又は2に記載の情報処理方法。
- [請求項4] 前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状ごとの数を示す個数情報を更に取得し、  
前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を、前記個数情報が示す形状ごとの数だけ隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成する、  
請求項3に記載の情報処理方法。
- [請求項5] 前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状ごとの構成比を示す構成比情報を更に取得し、

前記第2情報を生成するステップでは、前記形状情報が示す形状の前記複数の多面体を、前記構成比情報が示す形状ごとの構成比で隙間なく配置させた前記3次元構造に関する前記第2情報を生成する、  
請求項3に記載の情報処理方法。

[請求項6] 前記第1情報を取得するステップでは、前記第1情報として、前記複数の多面体の形状の許容される歪度を示す歪度情報を更に取得し、  
前記第2情報を生成するステップでは、前記歪度情報が示す歪度を超えないように前記複数の多面体の少なくとも一部を歪ませた前記3次元構造に関する第2情報を生成する、  
請求項3～5のいずれか1項に記載の情報処理方法。

[請求項7] 前記歪度は、前記形状情報が示す多面体の形状を基準として、前記多面体の重心の位置、前記多面体の少なくとも1つの頂点の位置、前記多面体の少なくとも1つの辺の長さ、前記多面体の少なくとも2つの辺がなす角度、及び前記多面体の少なくとも1つの面の面積のうちの少なくとも1つに基づいて決定される、  
請求項6に記載の情報処理方法。

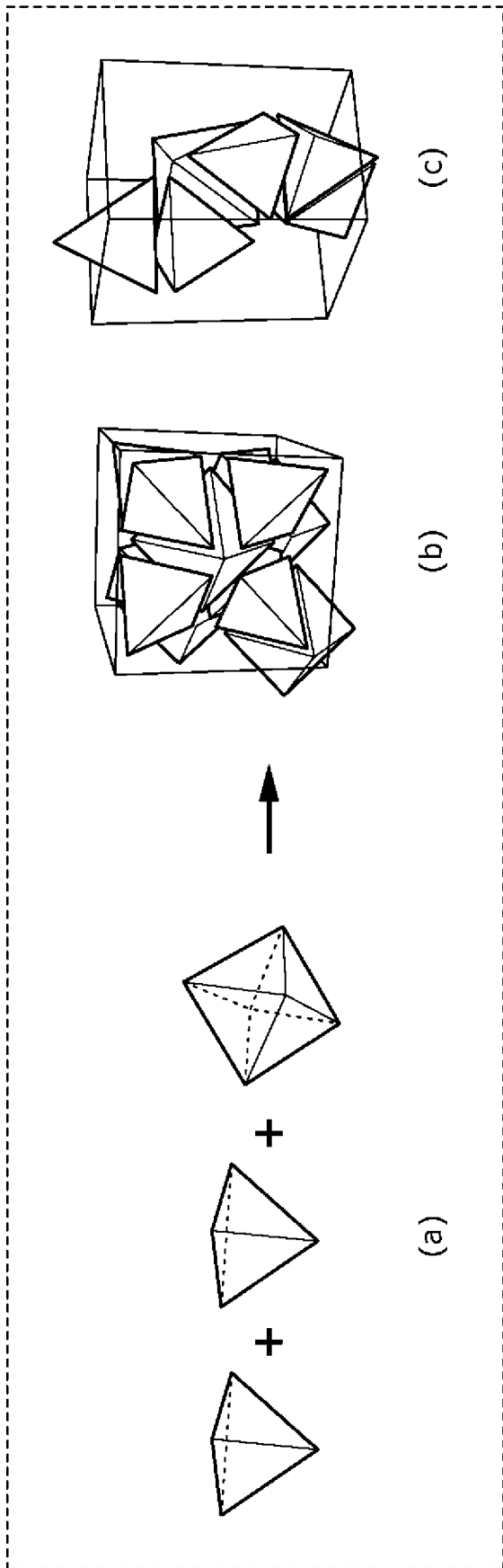
[請求項8] 前記3次元構造の用途に関する第3情報を取得するステップを更に含み、  
前記第2情報を生成するステップでは、前記第1情報に基づいて生成した前記3次元構造に、前記第3情報が示す用途に基づく情報を付与した前記3次元構造に関する前記第2情報を生成する、  
請求項1～7のいずれか1項に記載の情報処理方法。

[請求項9] 前記第2情報を生成するステップは、  
取得した前記第1情報を、前記複数の多面体をそれぞれ表す複数の第1数列に変換するステップと、  
変換した前記複数の第1数列を用いて生成された多胞体を表す第2数列を前記3次元構造に変換するステップと、を有する、  
請求項1～8のいずれか1項に記載の情報処理方法。

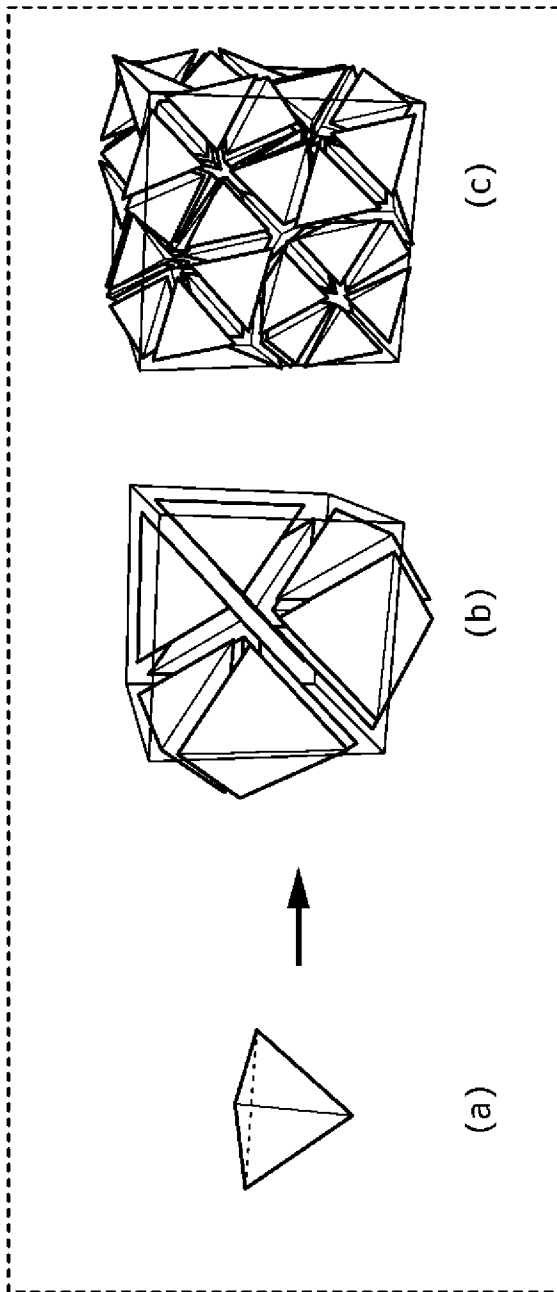
- [請求項10] 前記第2情報を生成するステップは、  
取得した前記第1情報を、前記複数の多面体をそれぞれ表す複数の多面体グラフに変換するステップと、  
変換した前記複数の多面体グラフを用いて生成された周期グラフを前記3次元構造に変換するステップと、を有する、  
請求項1～8のいずれか1項に記載の情報処理方法。
- [請求項11] 互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報の入力を受け付ける第1画像を表示する表示部と、  
入力された前記第1情報に基づいて生成された、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を表す第2画像を前記表示部に表示させる表示制御部と、を備え、  
前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である、  
情報処理システム。
- [請求項12] 前記表示部は、前記3次元構造の用途に関する第3情報の入力を受け付ける第3画像を更に表示し、  
前記3次元構造は、入力された前記第1情報に基づいて生成され、かつ、入力された前記第3情報が示す用途に基づく情報が付与された構造である、  
請求項11に記載の情報処理システム。
- [請求項13] 互いに形状が異なる2種類以上の多面体を含む複数の多面体に関する第1情報を取得するステップと、  
前記第1情報に基づいて、前記複数の多面体を配置させた3次元構造に関する第2情報を生成するステップと、  
生成した前記第2情報を出力するステップと、をコンピュータに実行させ、  
前記3次元構造は、前記複数の多面体が隙間なく配置された構造である、

プログラム。

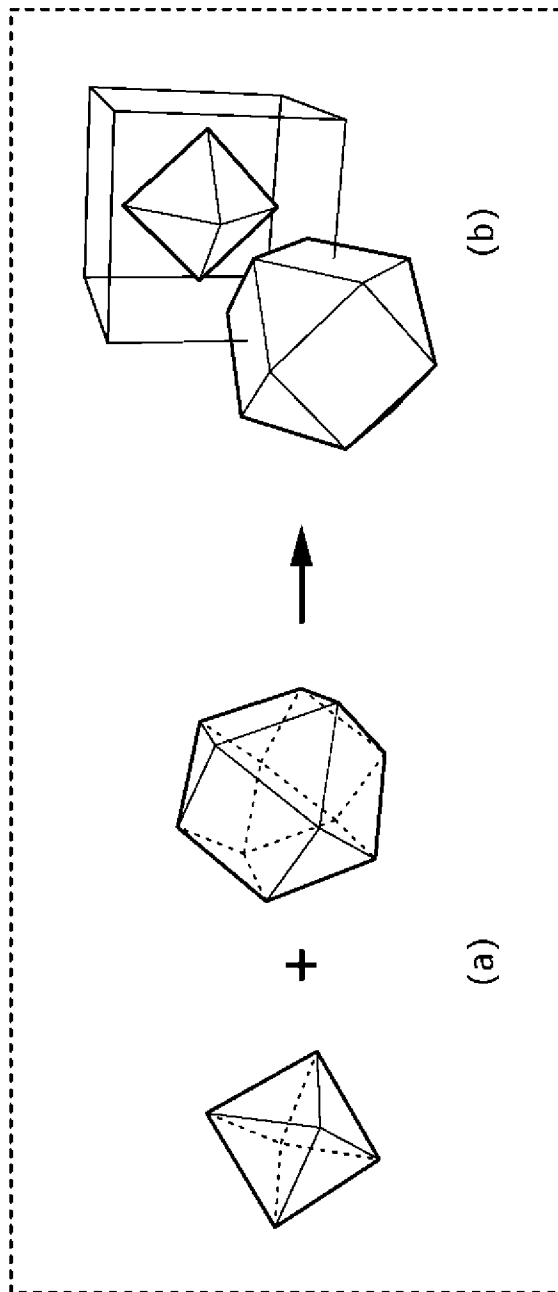
[図1]



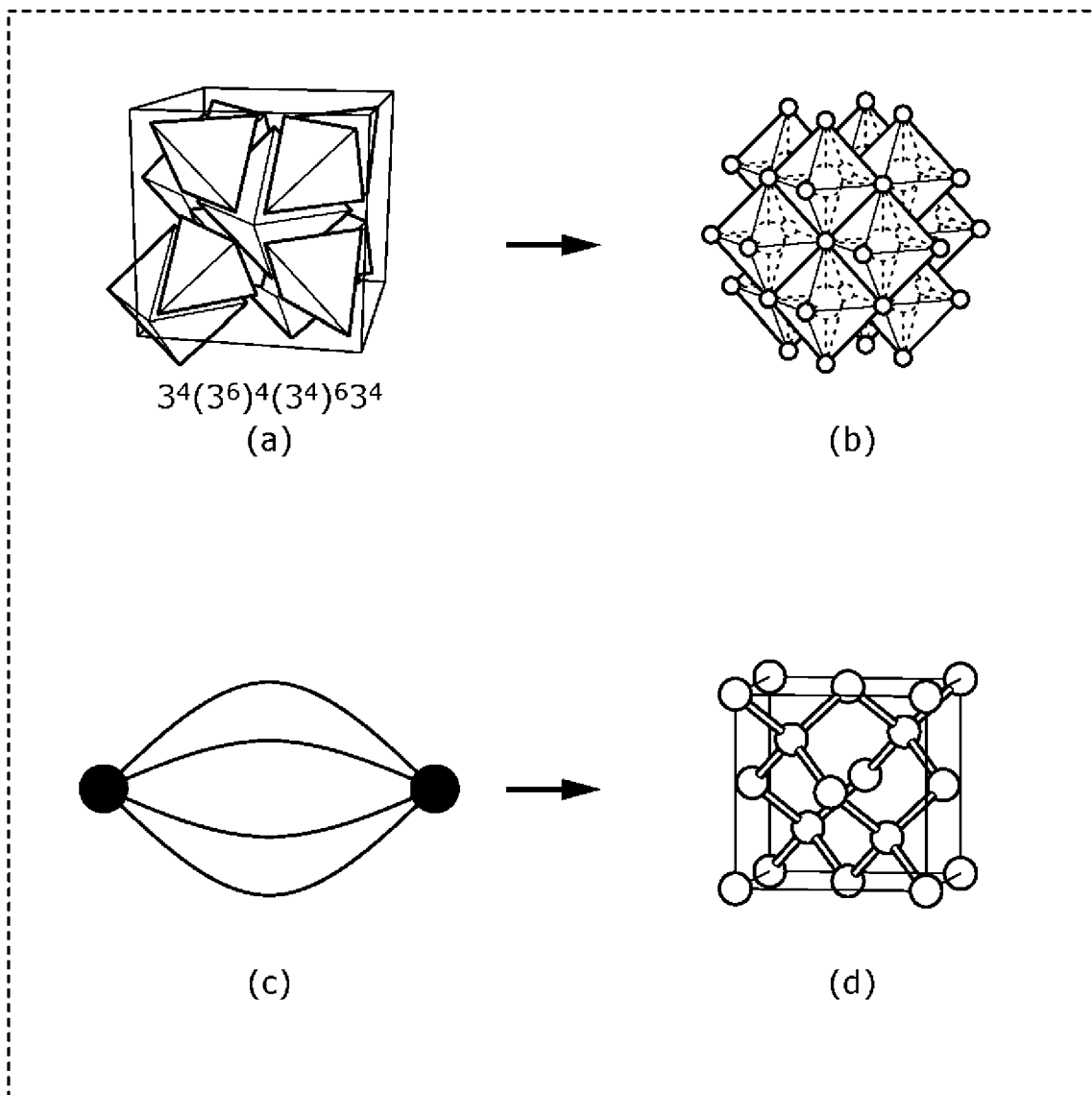
[図2]



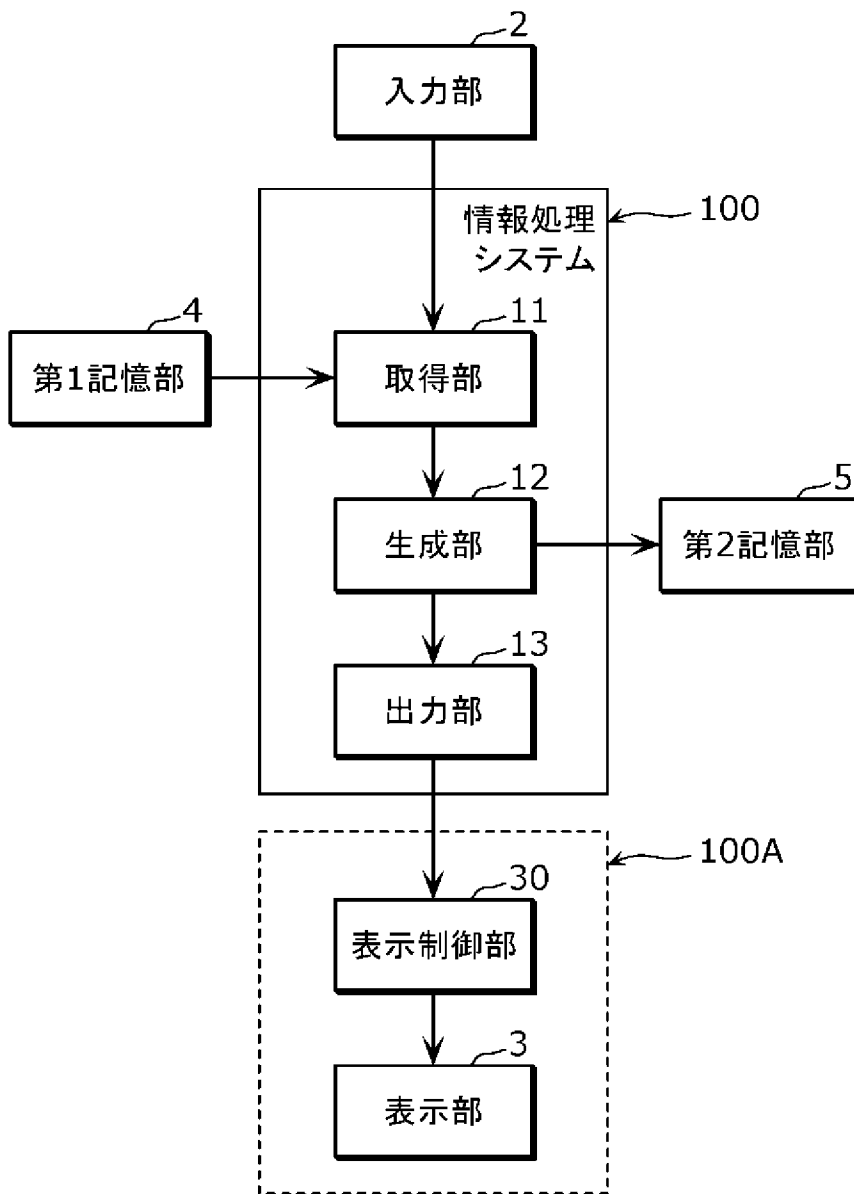
[図3]



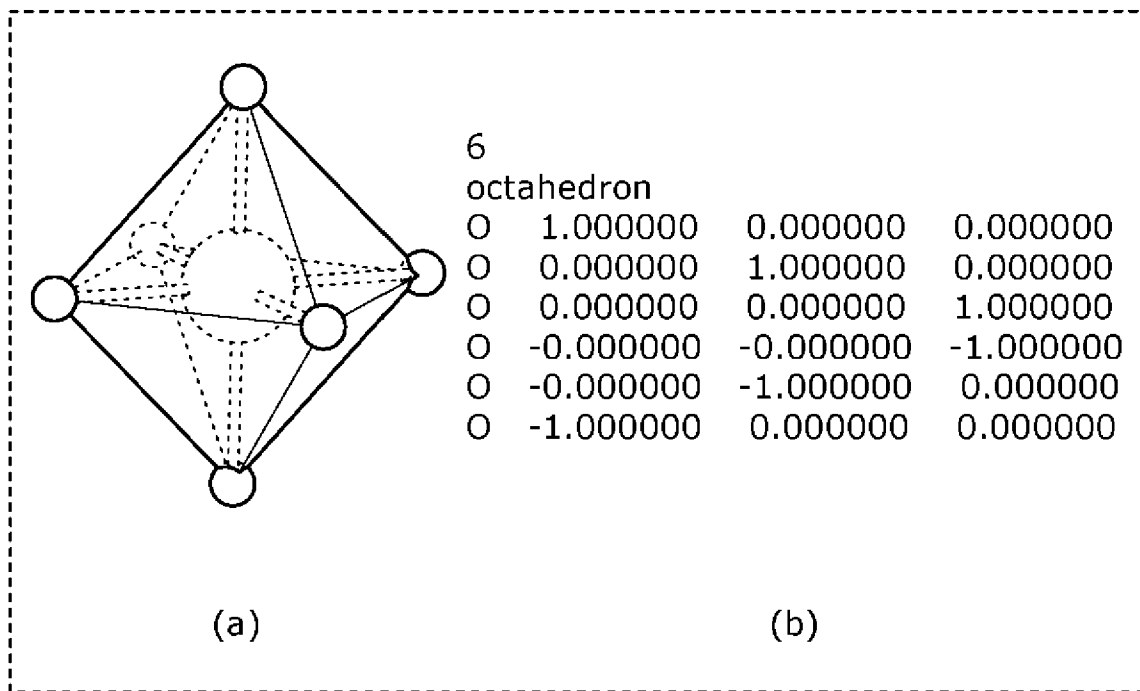
[図4]



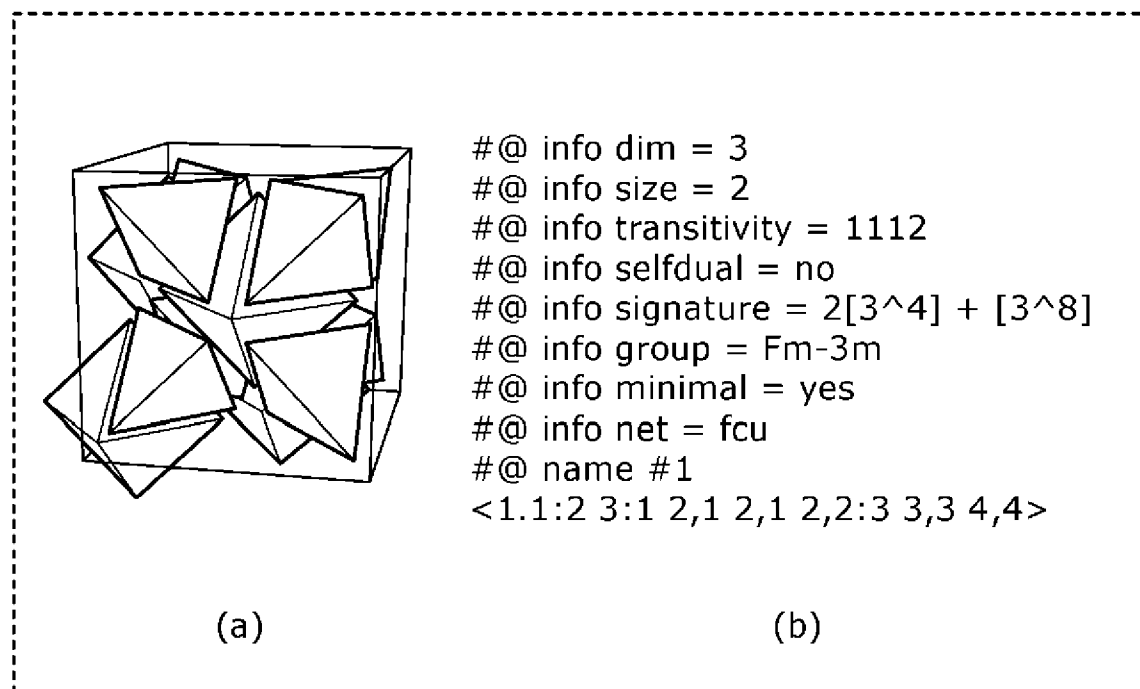
[図5]



[図6]



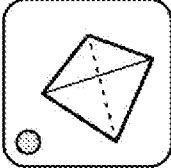
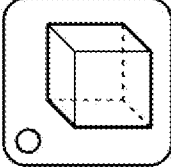
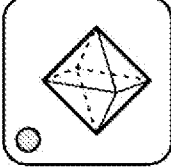
[図7]

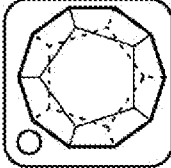
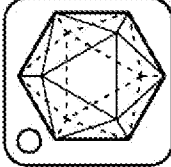


[図8]

(a)

多面体を選択してください

    オプション  
購入で  
使用可能

ブラベ格子を選択してください

cubic  
 tetragonal

3次元構造を生成

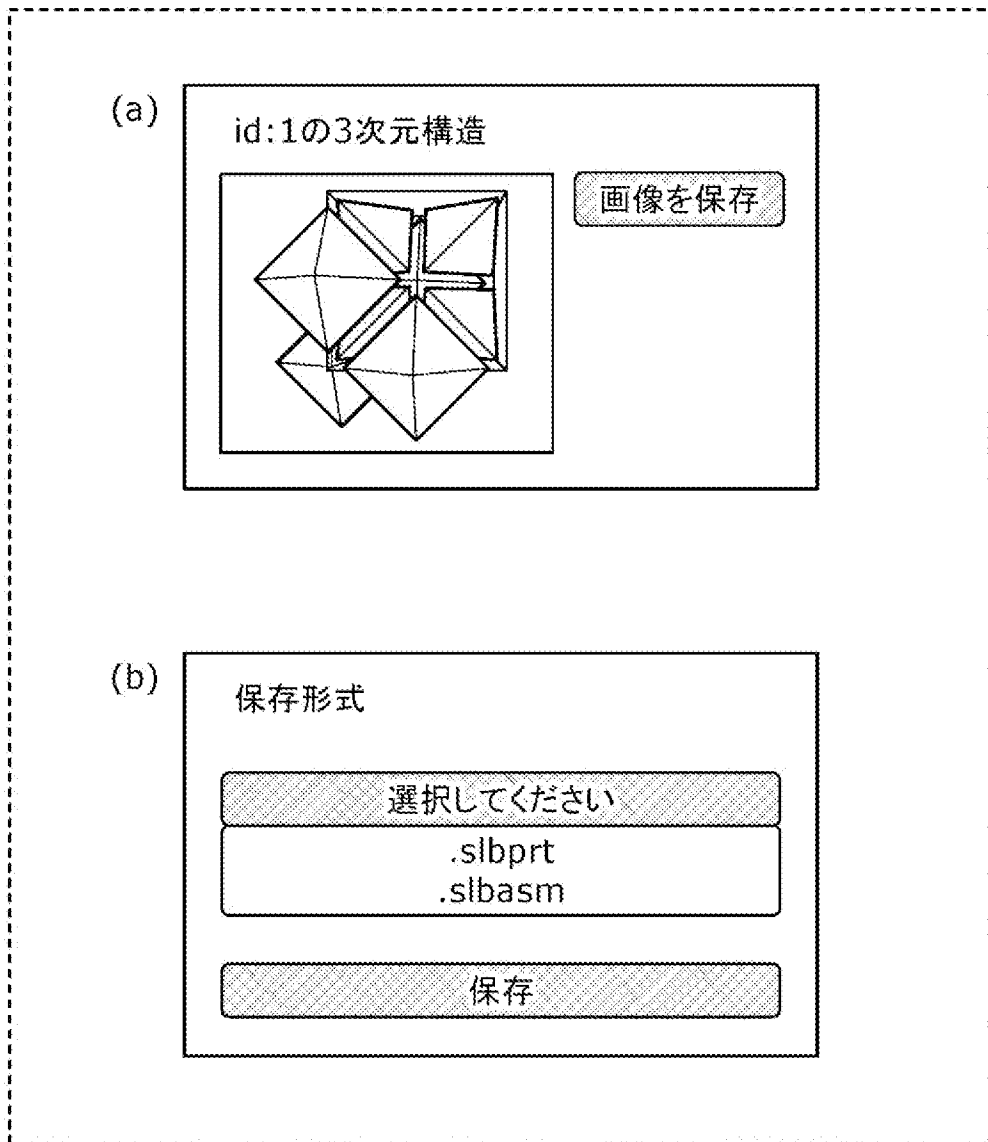
(b)

生成結果 (3件)

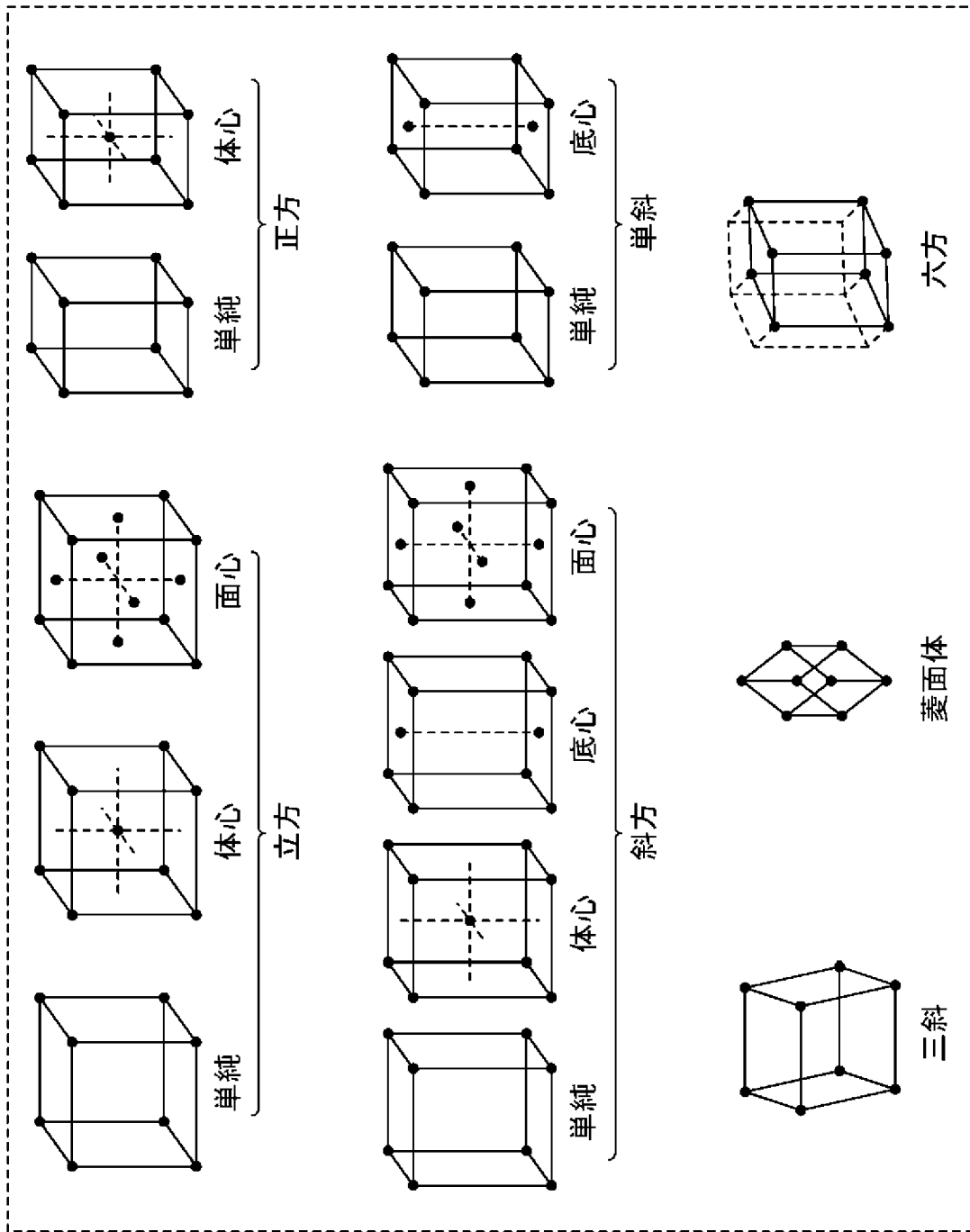
id	多面体数	空間群
<input checked="" type="radio"/> 1	1:2	Pnma
<input type="radio"/> 2	2:4	P4
<input type="radio"/> 3	2:4	P1

選択した3次元構造をエクスポート

[図9]

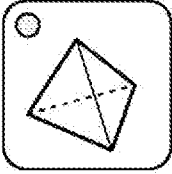
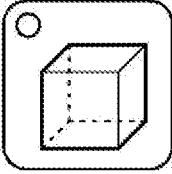
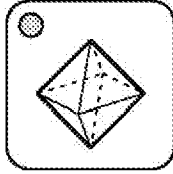
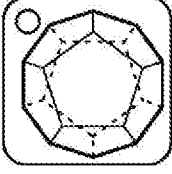
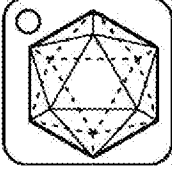


[図10]



[図11]

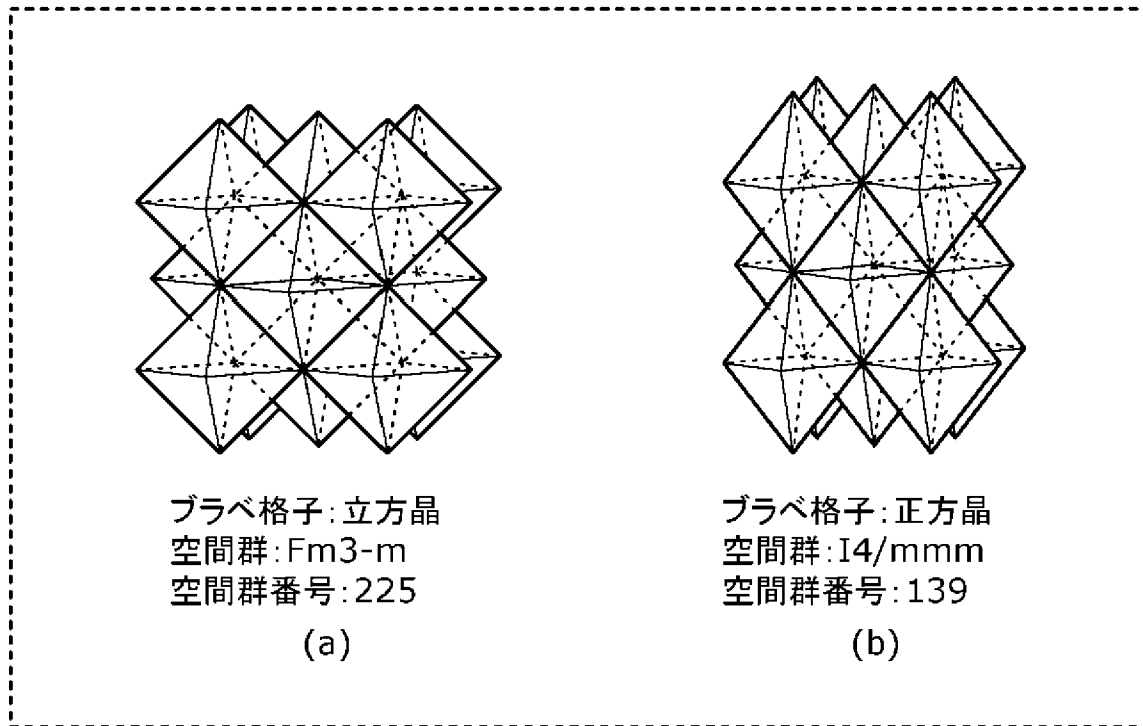
多面体を選択してください

<input type="radio"/> 	<input type="radio"/> 	<input type="radio"/> 
<input type="radio"/> 	<input type="radio"/> 	<input type="radio"/> オプション 購入で 使用可能

空間群を設定してください


3次元構造を生成

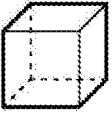
[図12]





[図13]


多面体を選択してください











オプション  
購入で  
使用可能

多面体の構成比を設定してください

四面体    八面体

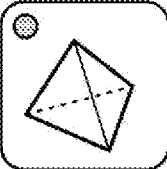
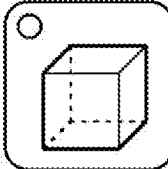
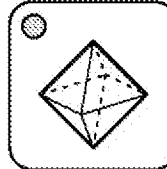
2


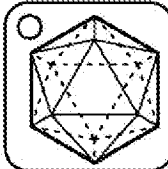
1

3次元構造を生成

[図14]

多面体を選択してください

    オプション  
購入で  
使用可能

多面体の構成比を設定してください

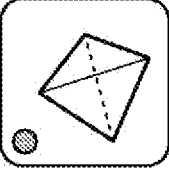
四面体 八面体

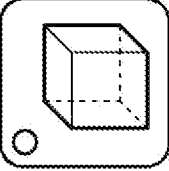
3次元構造を生成


[図15]

(a)

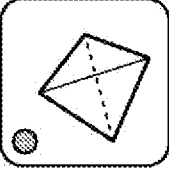
多面体を選択してください

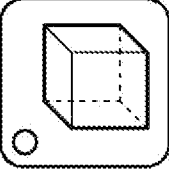







オプション  
購入で  
使用可能







多面体の数を設定してください

四面体  八面体

許容する歪度を設定してください

3次元構造を生成

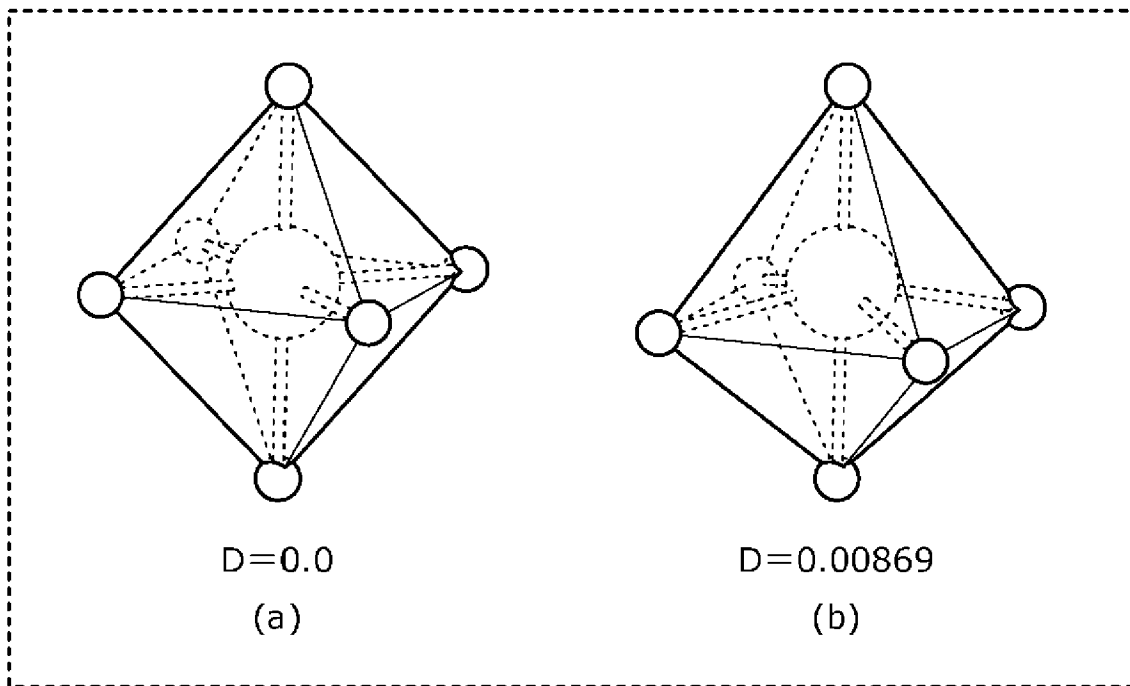
(b)

生成結果 (3件)

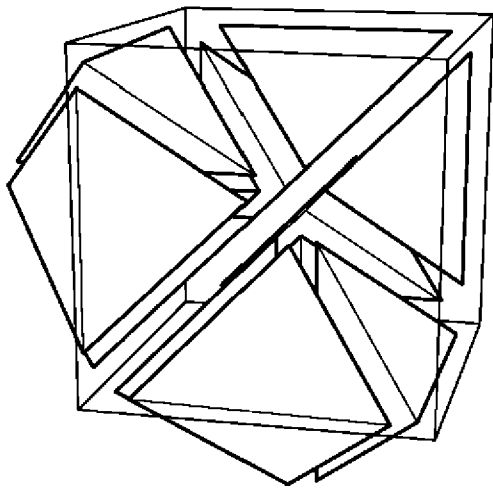
id	合計歪	多面体数	空間群
<input checked="" type="radio"/> 1	1	1:2	Pnma
<input type="radio"/> 2	0.98	2:4	P1
<input type="radio"/> 3	0.97	2:4	P1

選択した3次元構造をエクスポート

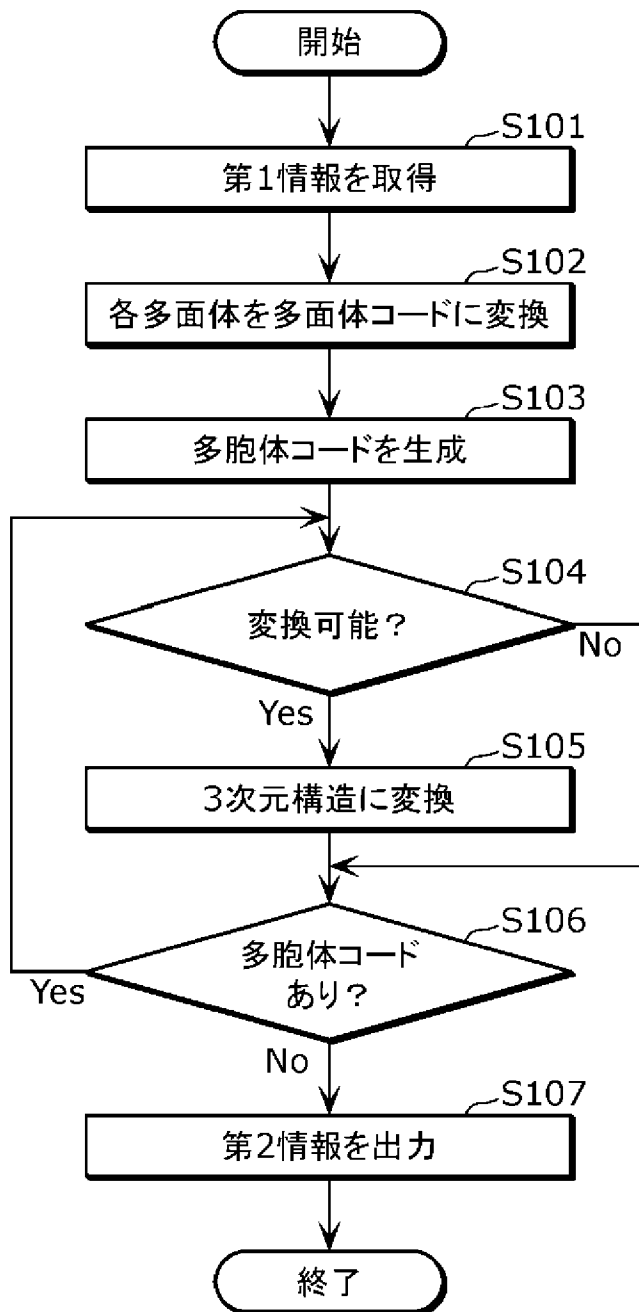
[圖16]



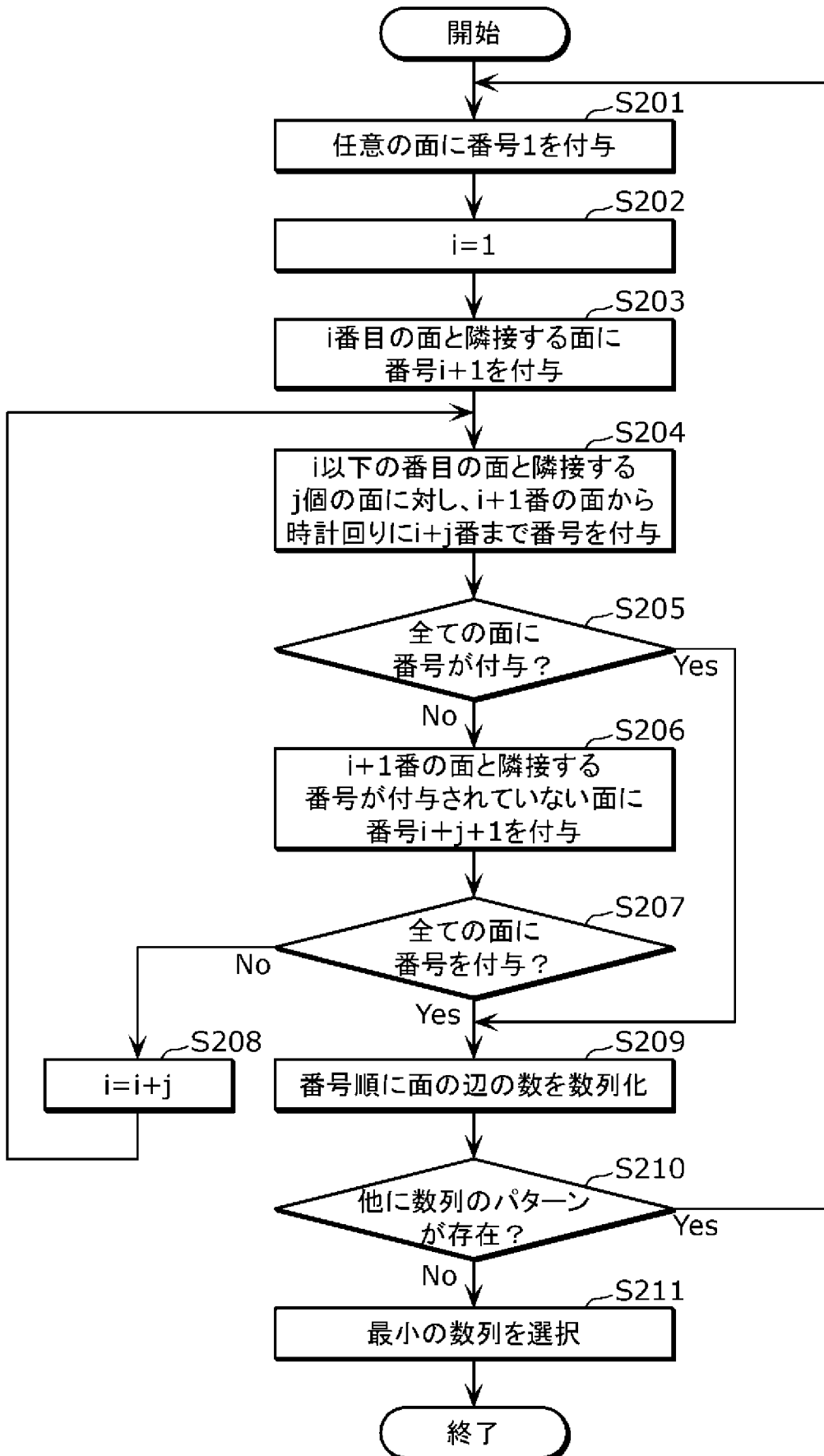
[圖17]



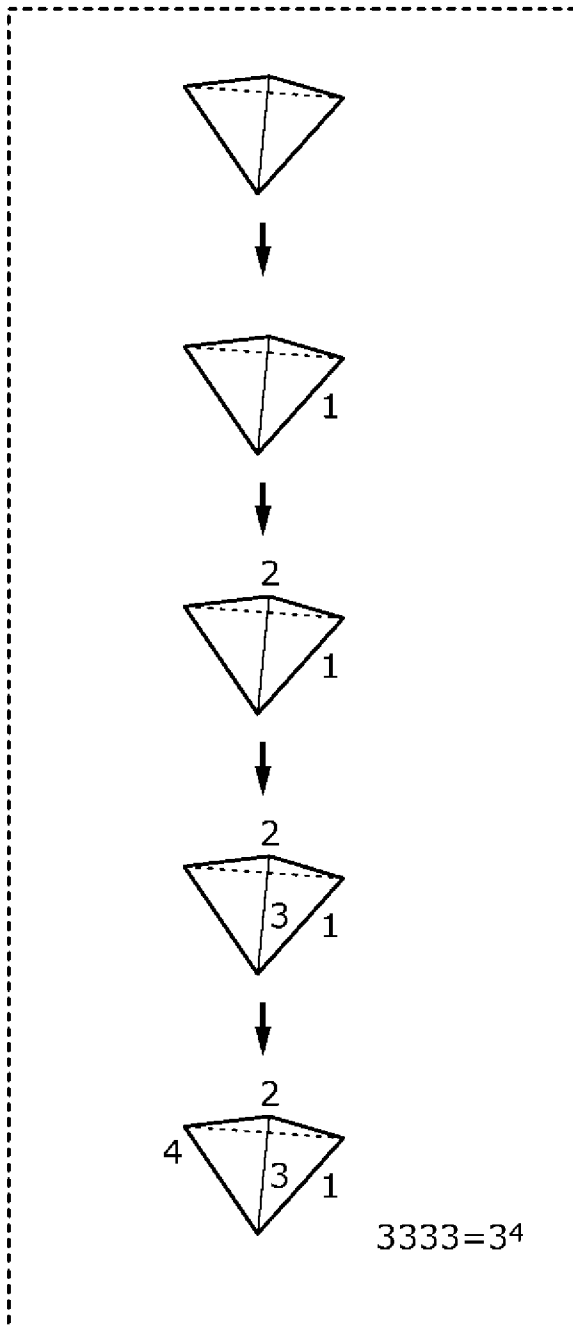
[図18]



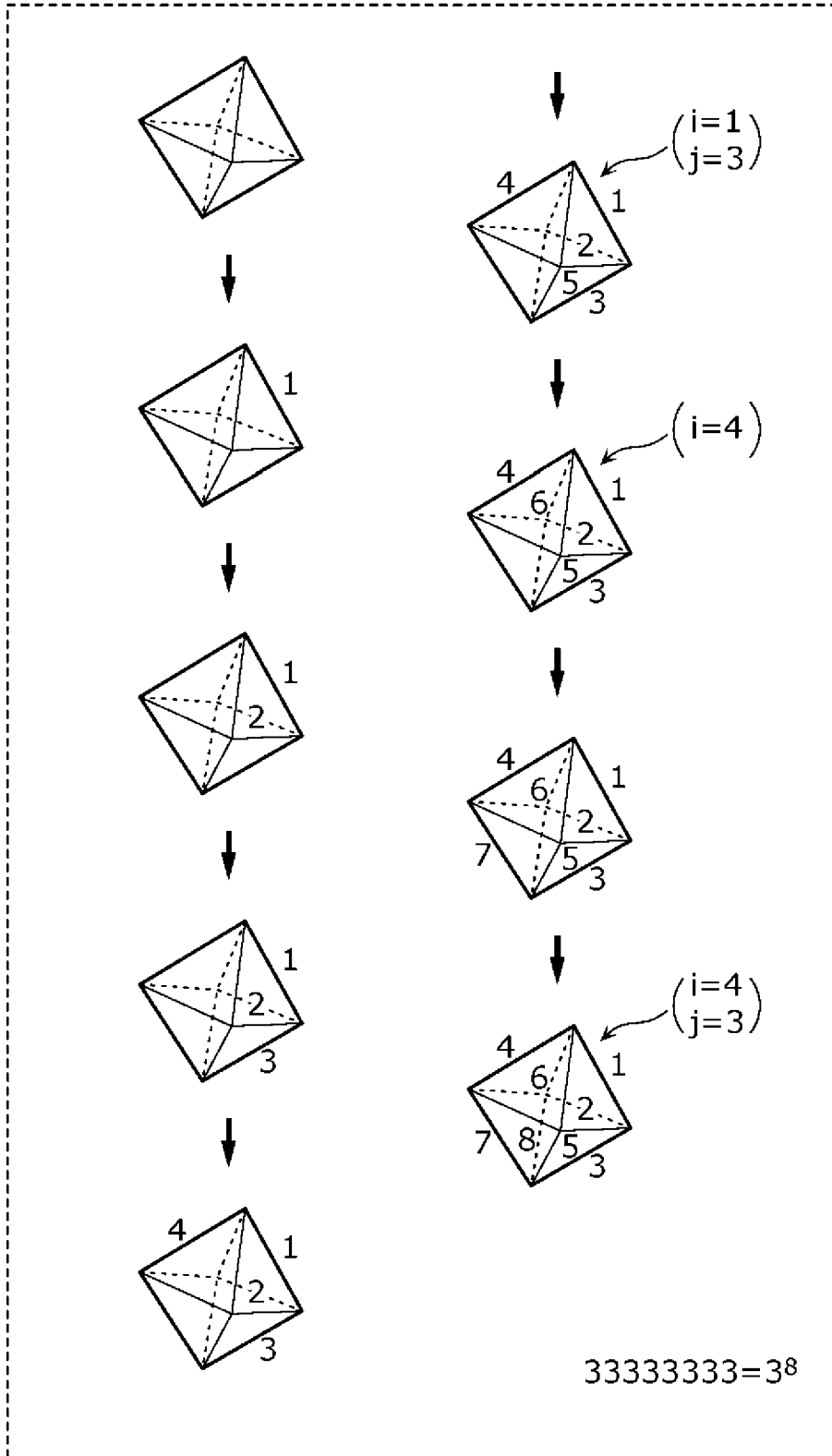
[図19]



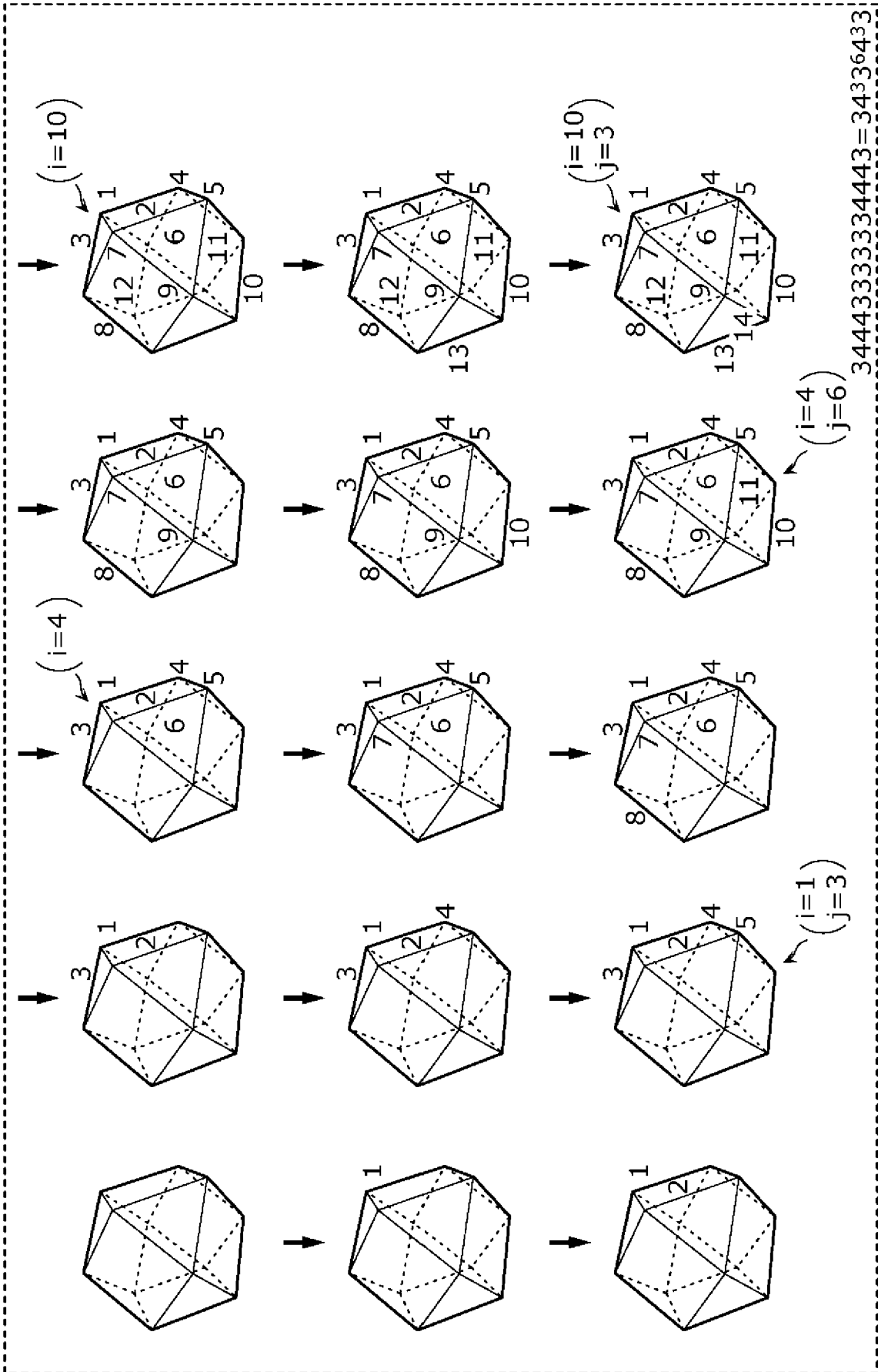
[図20]



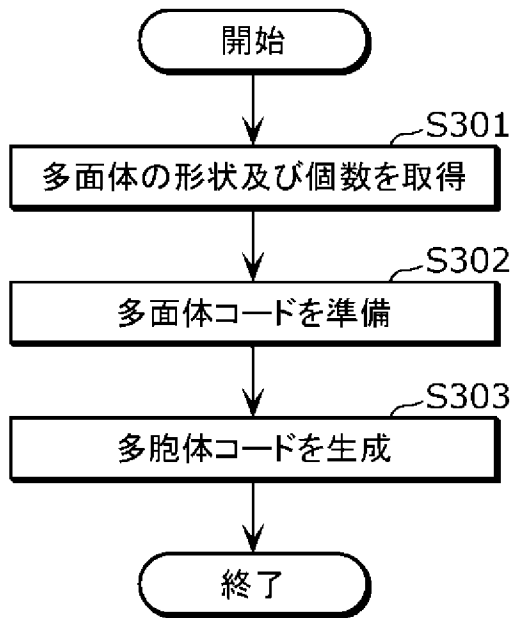
[図21]



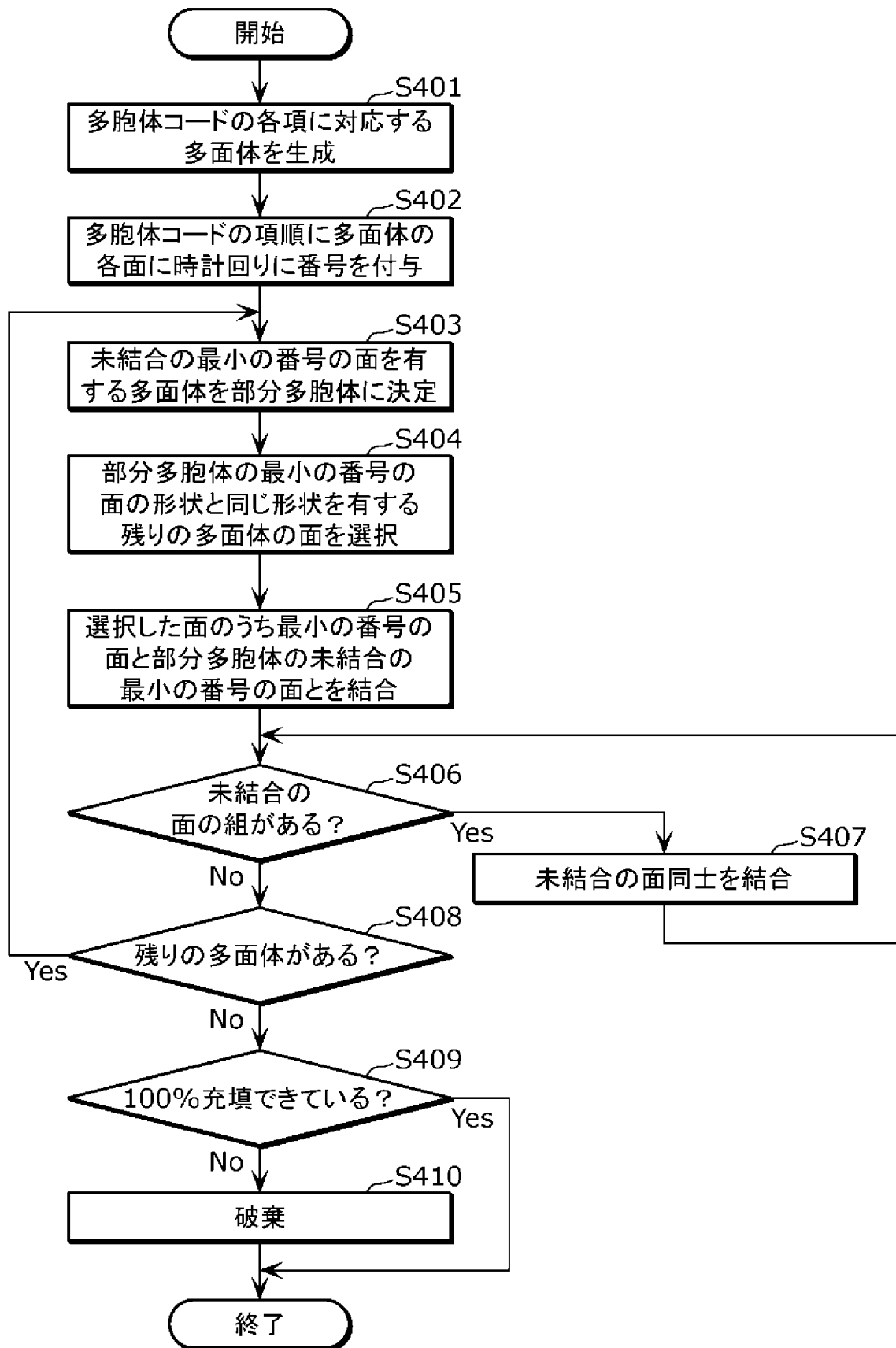
[図22]



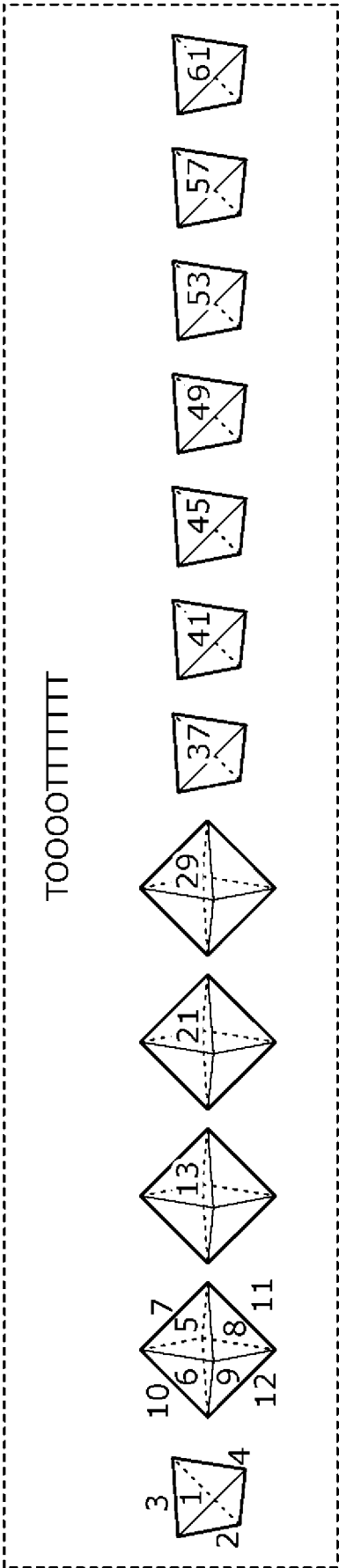
[図23]



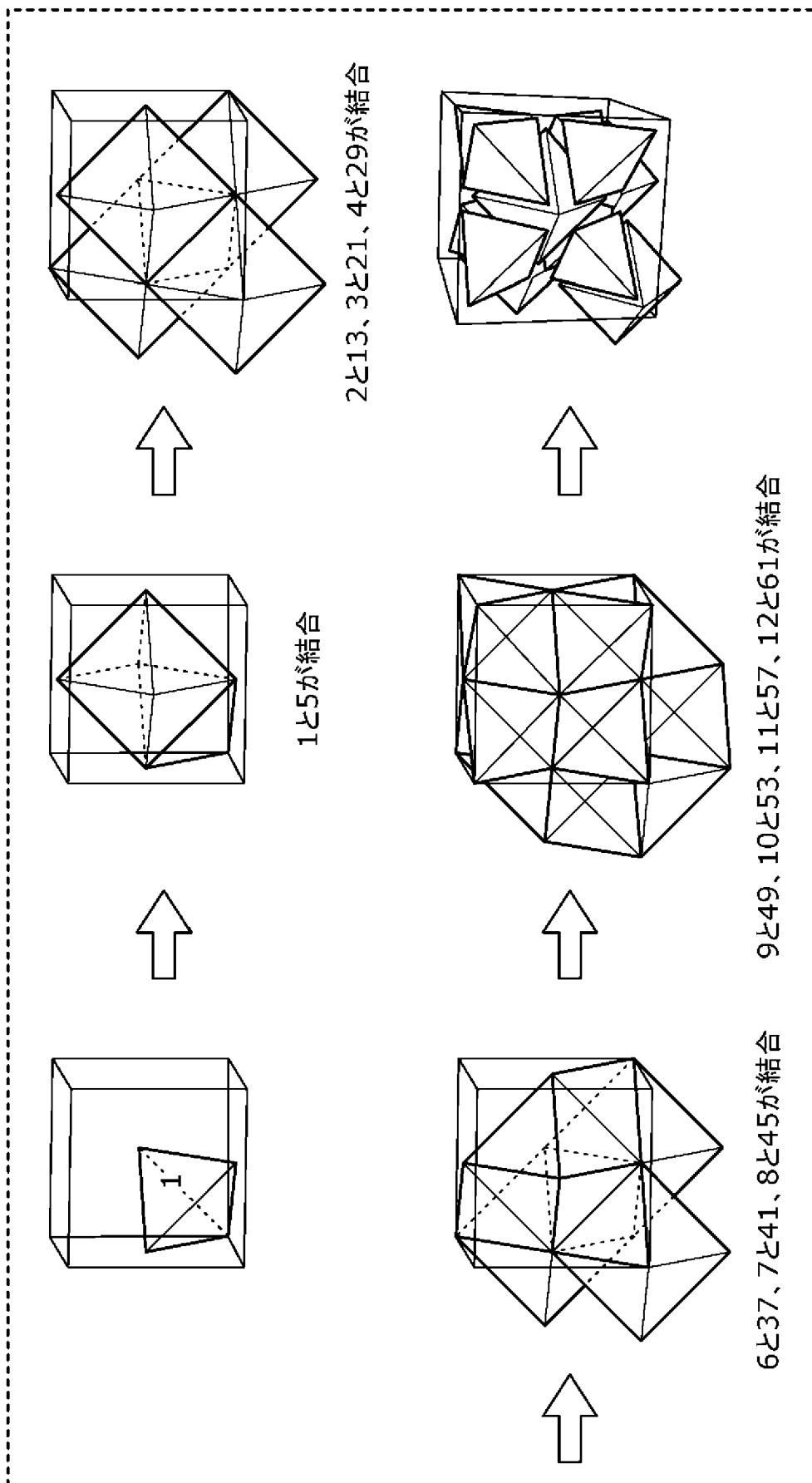
[図24]



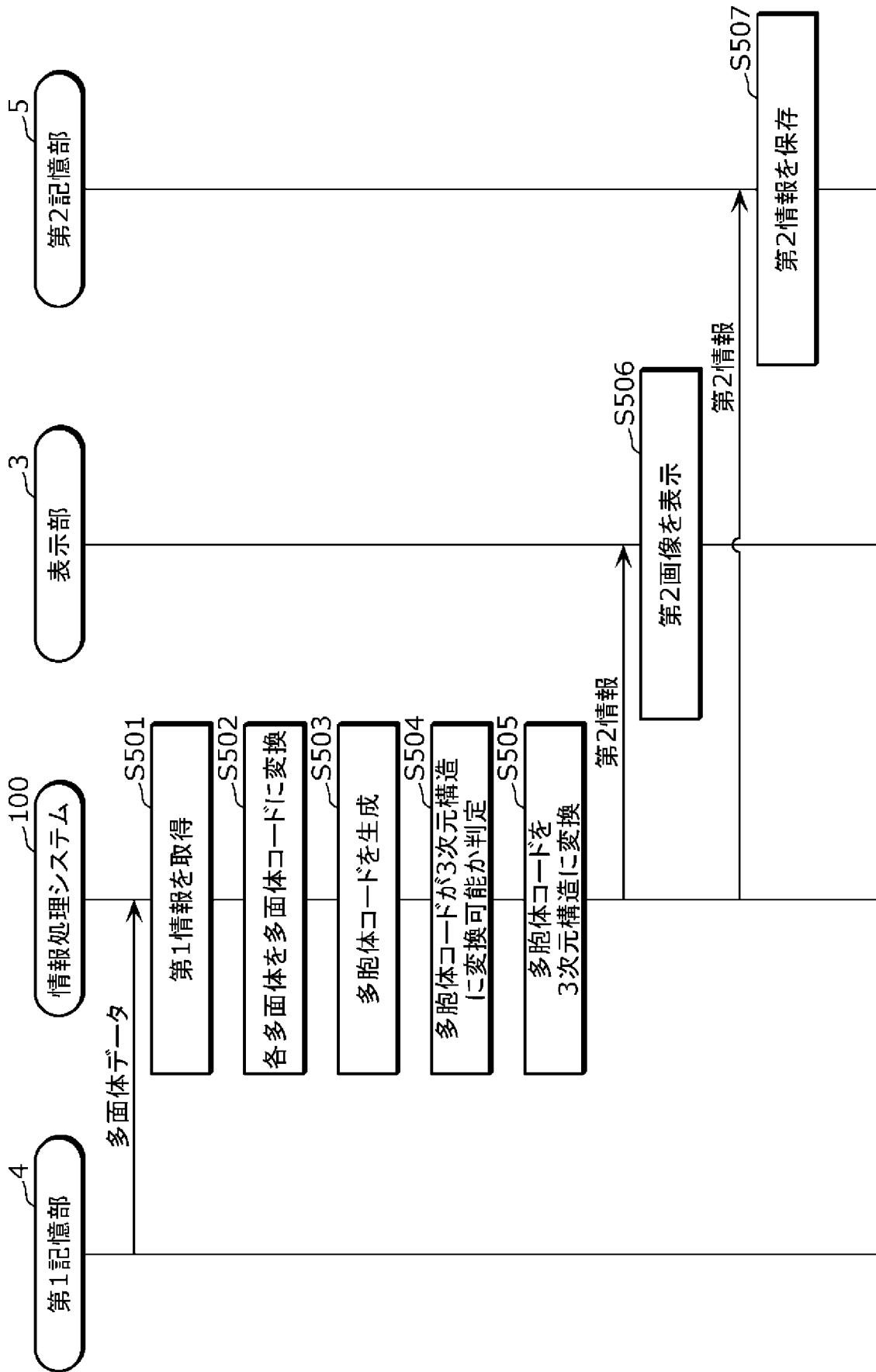
[図25]



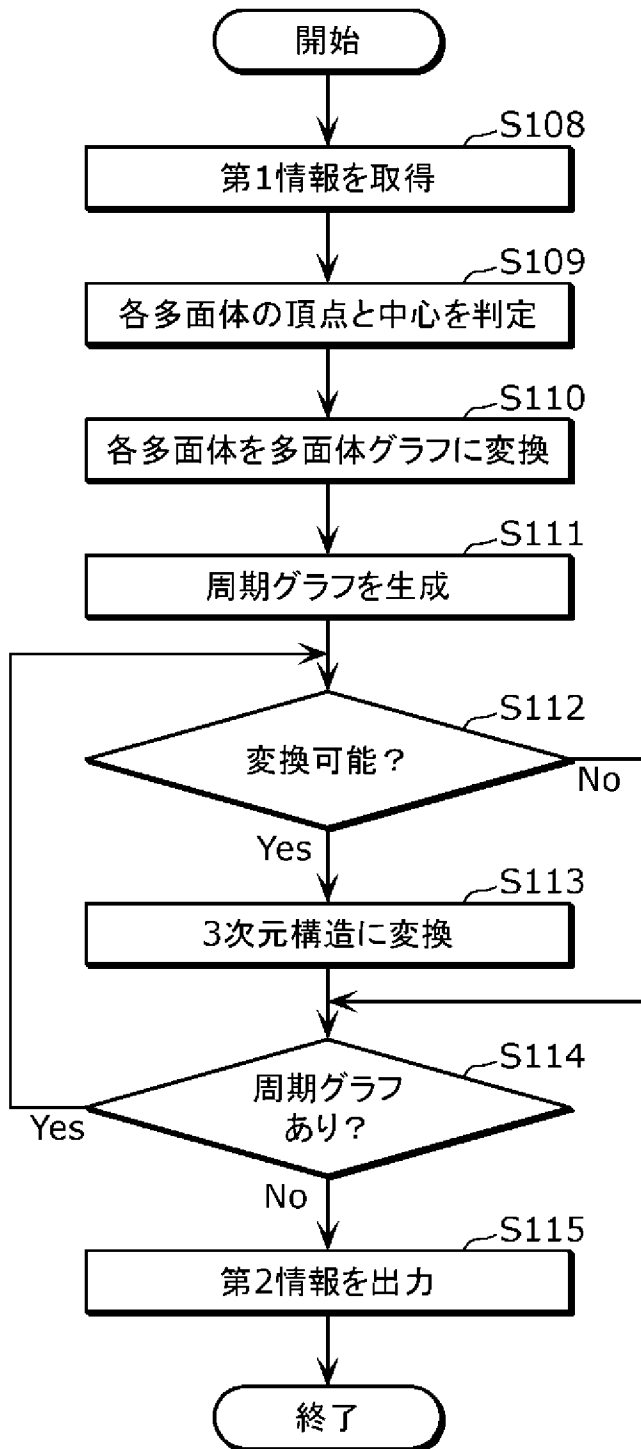
[図26]



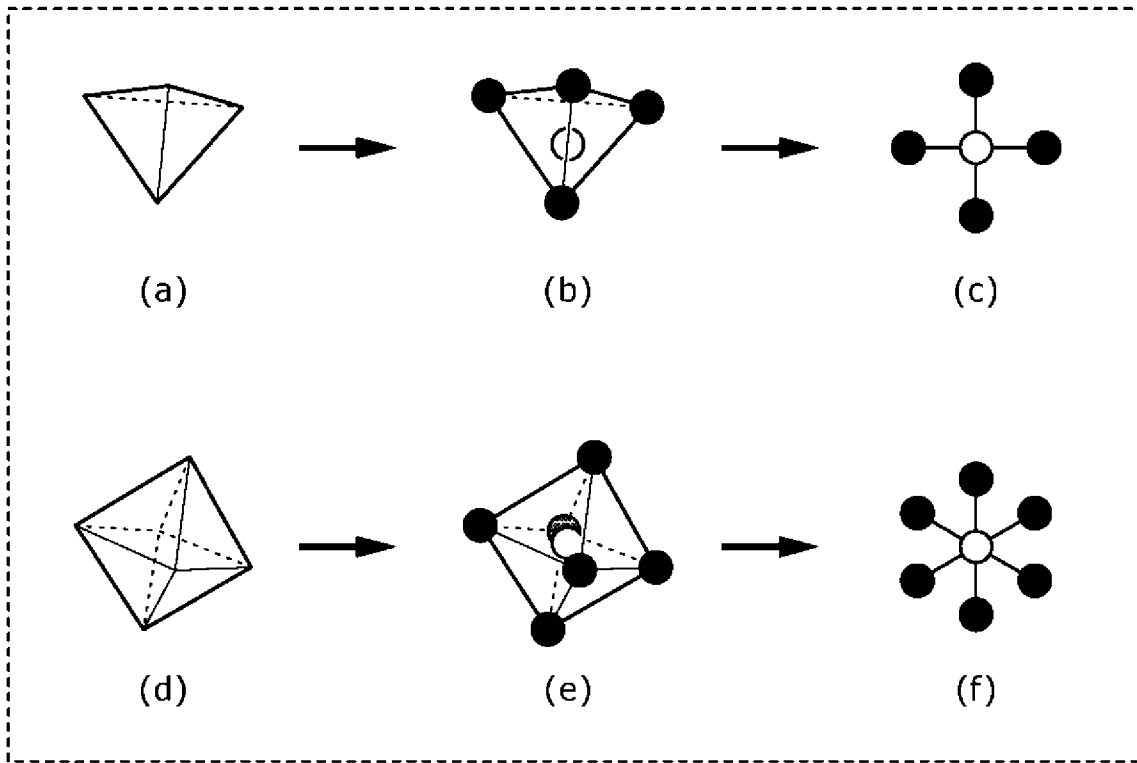
[図27]



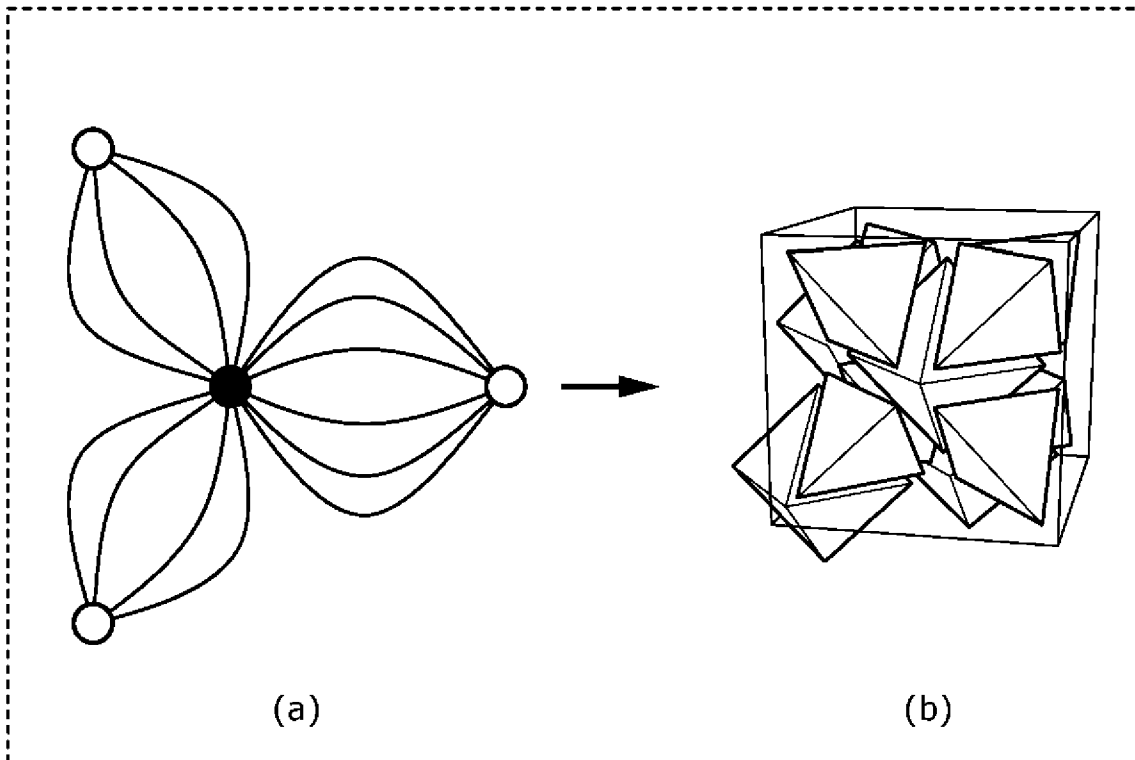
[図28]



[図29]



[図30]



[図31]

(a)

元素を選択してください

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																																	

斜線: 多面体の中心に配置  
ドット: 多面体の頂点に配置

次へ

(b)

組成を入力してください

CuInSe2

次へ

[図32]



下記の元素の配置を選択してください



	頂点	多面体中心	数
Cu		✓	1
In		✓	1
Se	✓		2

次へ

[図33]

多面体の組み合わせを選択してください

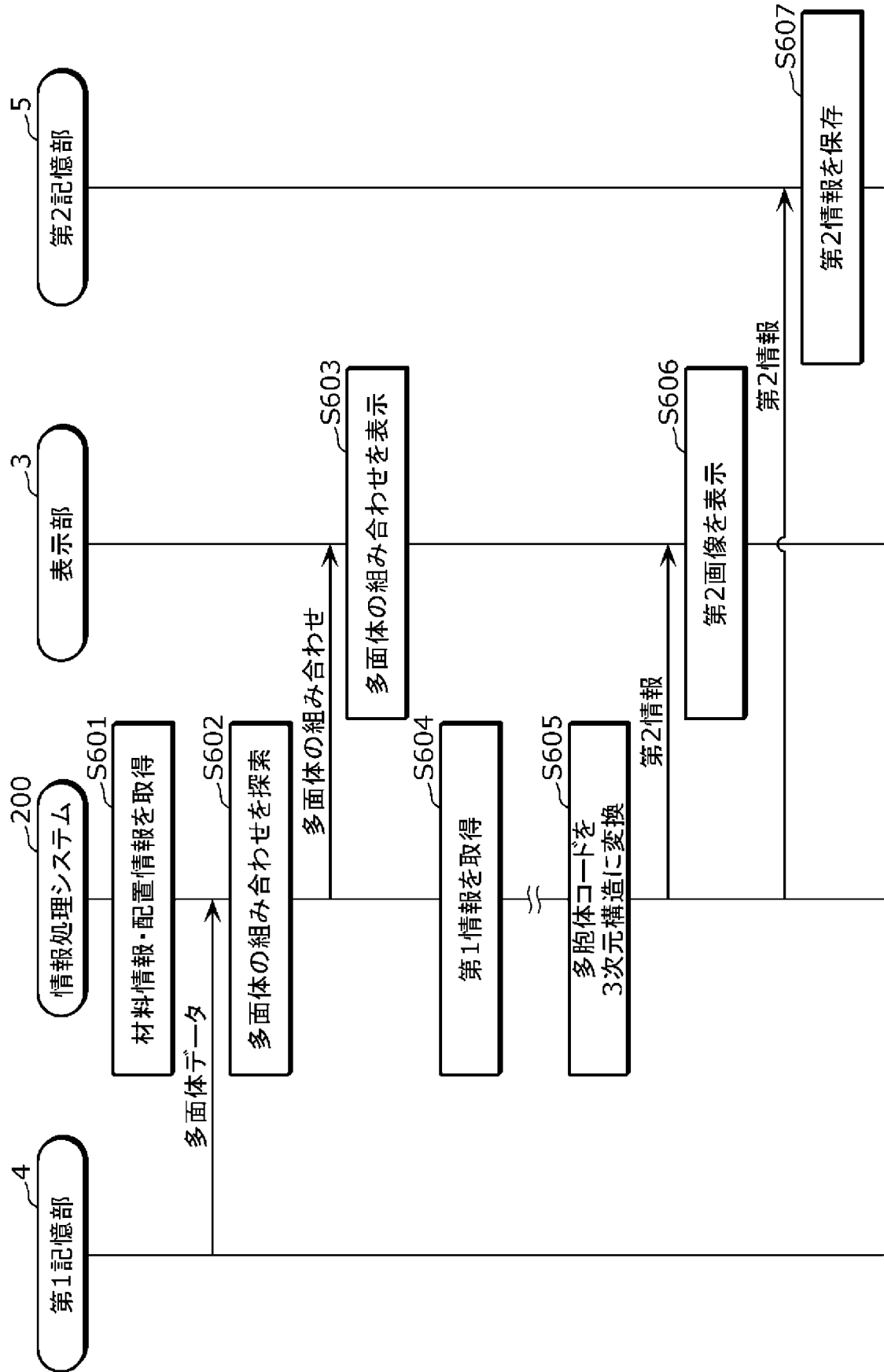
 ×2     ×1

 ×1     ×1

⋮

許容する歪度を設定してください

[図34]



[図35]

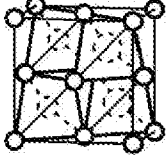
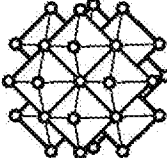
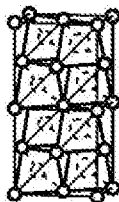
下記の元素の配置を選択してください

	頂点	多面体中心
Cu		✓
In		✓
Se	✓	

多面体情報を入力

[図36]

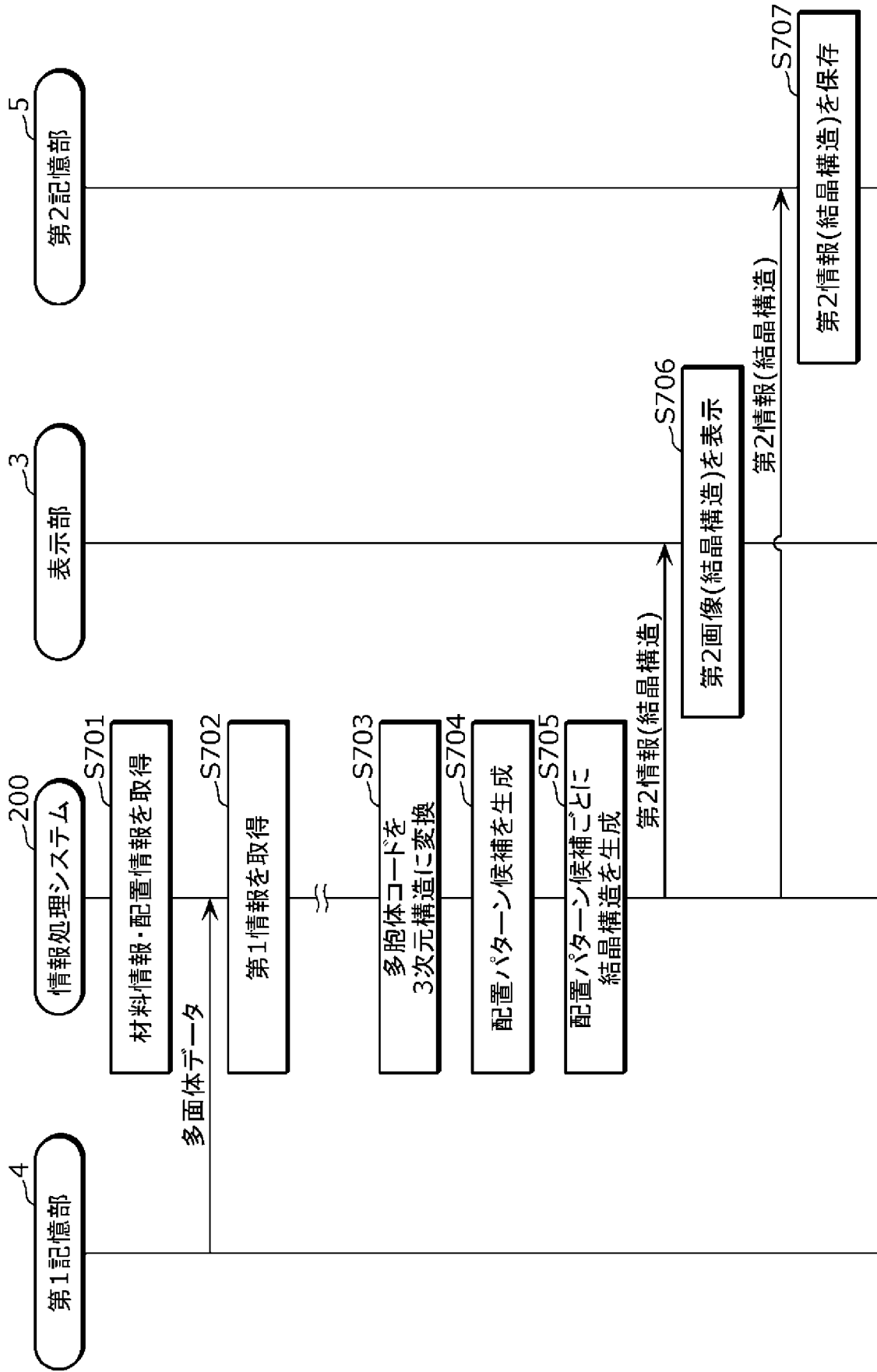
生成結果(●件)

	id:1 組成:CuInSe2 空間群:P -4m2 原子数:8
	id:2 組成:CuInSe2 空間群:P4/mmm 原子数:8
	id:3 組成:CuInSe2 空間群:I-42d 原子数:16

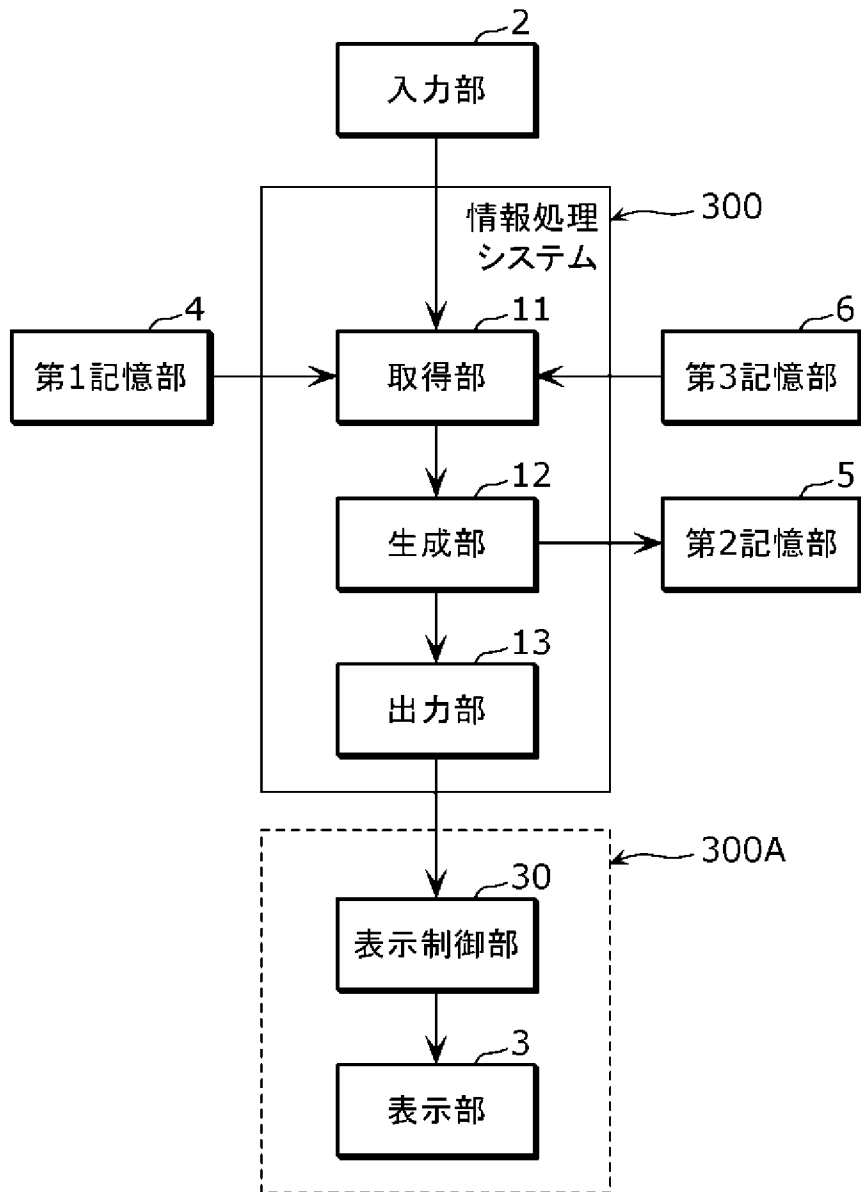
< 1 2 3 4 ..100 >

選択した3次元構造をエクスポート

[図37]





[図38]






[図39]

多面体を選択してください

四面体  


立方体  


八面体  


オプション  
購入で  
使用可能  
  


使用環境を選択してください

材料  
 玩具  
 インテリア

建築  
 食  
 都市設計

収納



多面体の数を設定してください

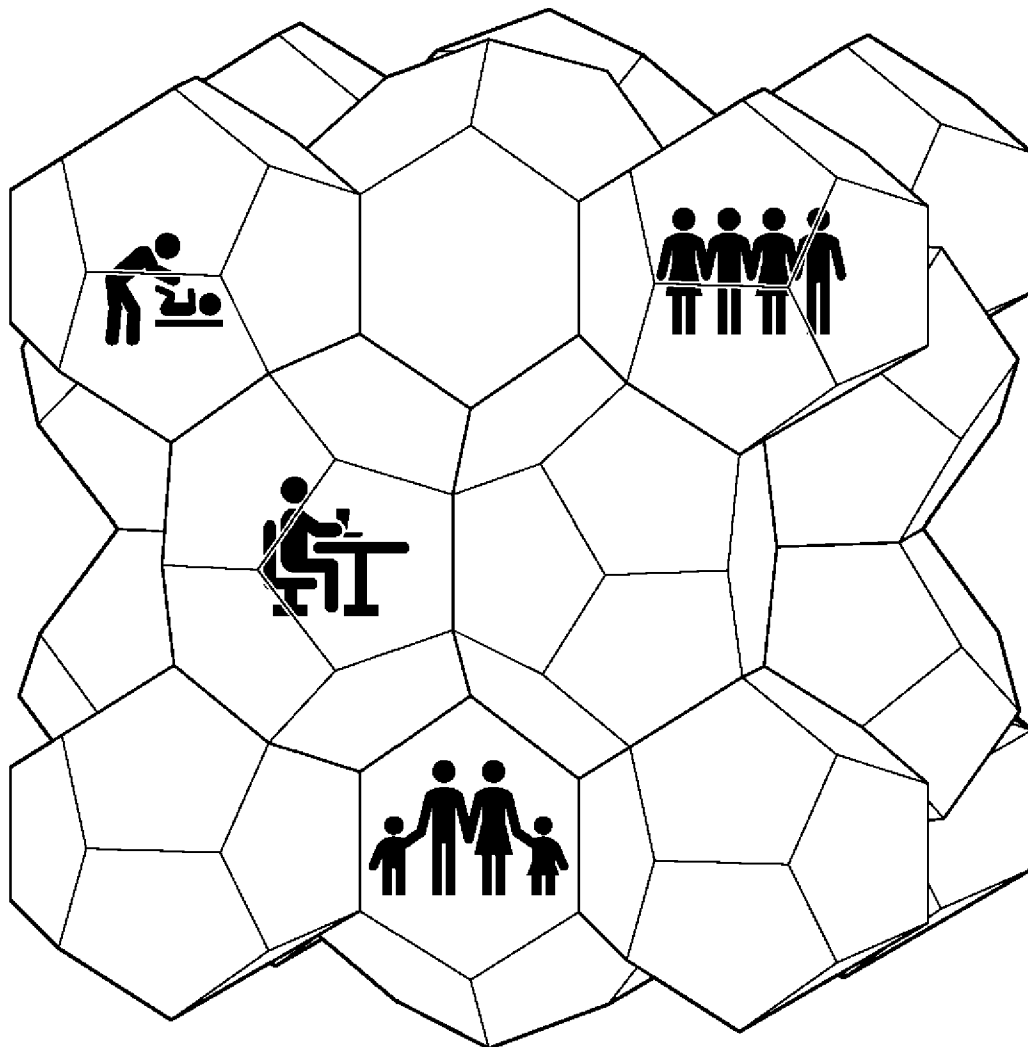
四面体  八面体

プラベ格子を選択してください

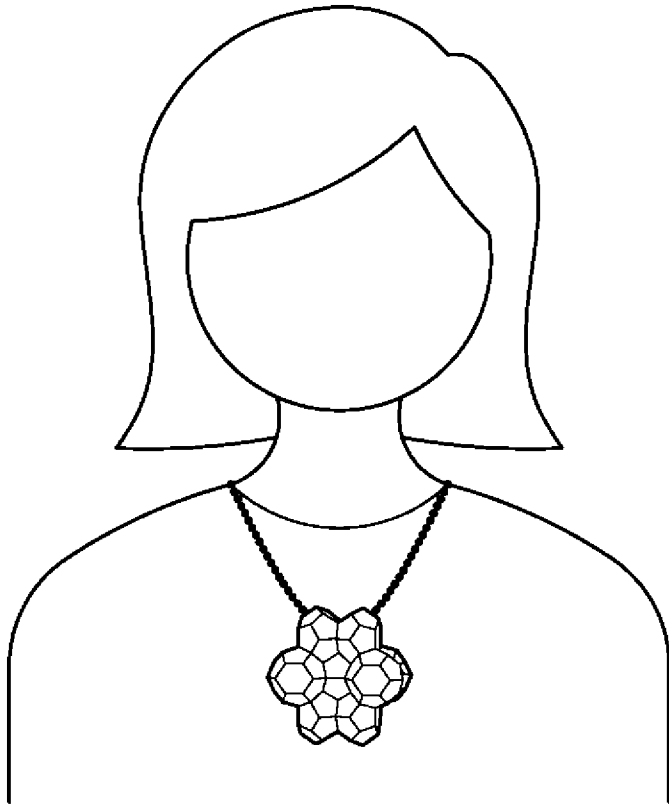
選択してください  
 cubic  
 tetragonal

3次元構造を生成

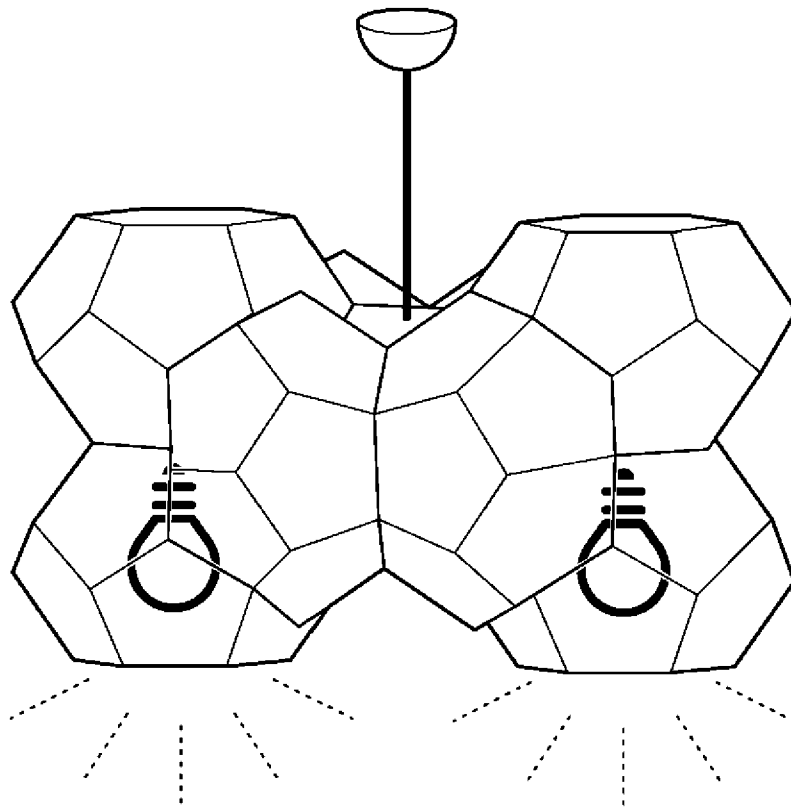
[図40]



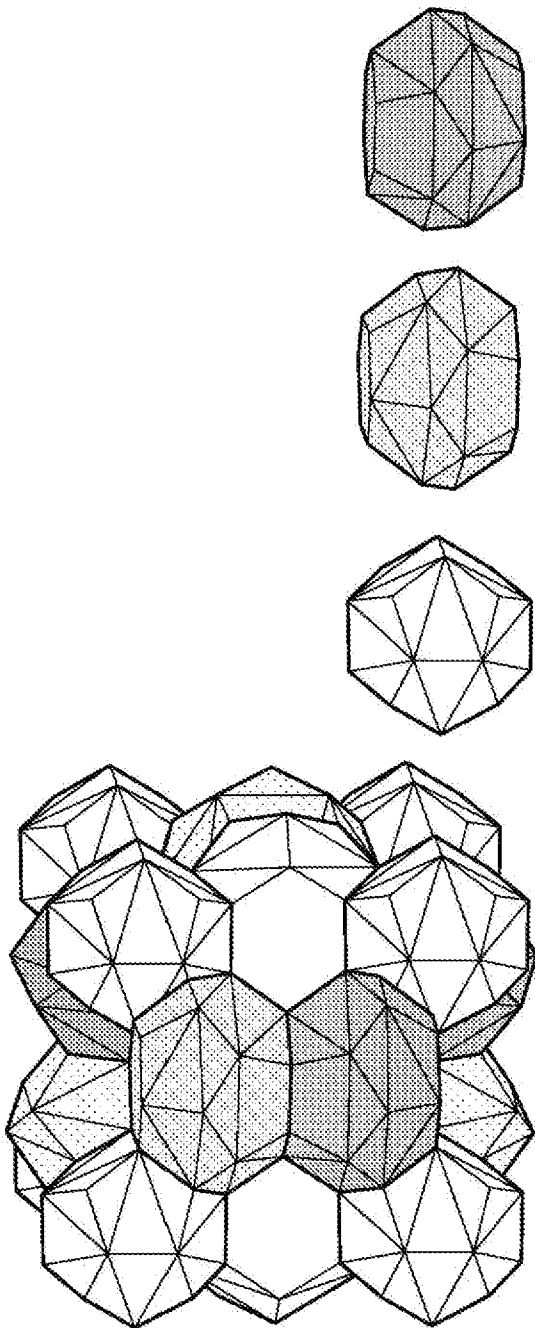
[図41]



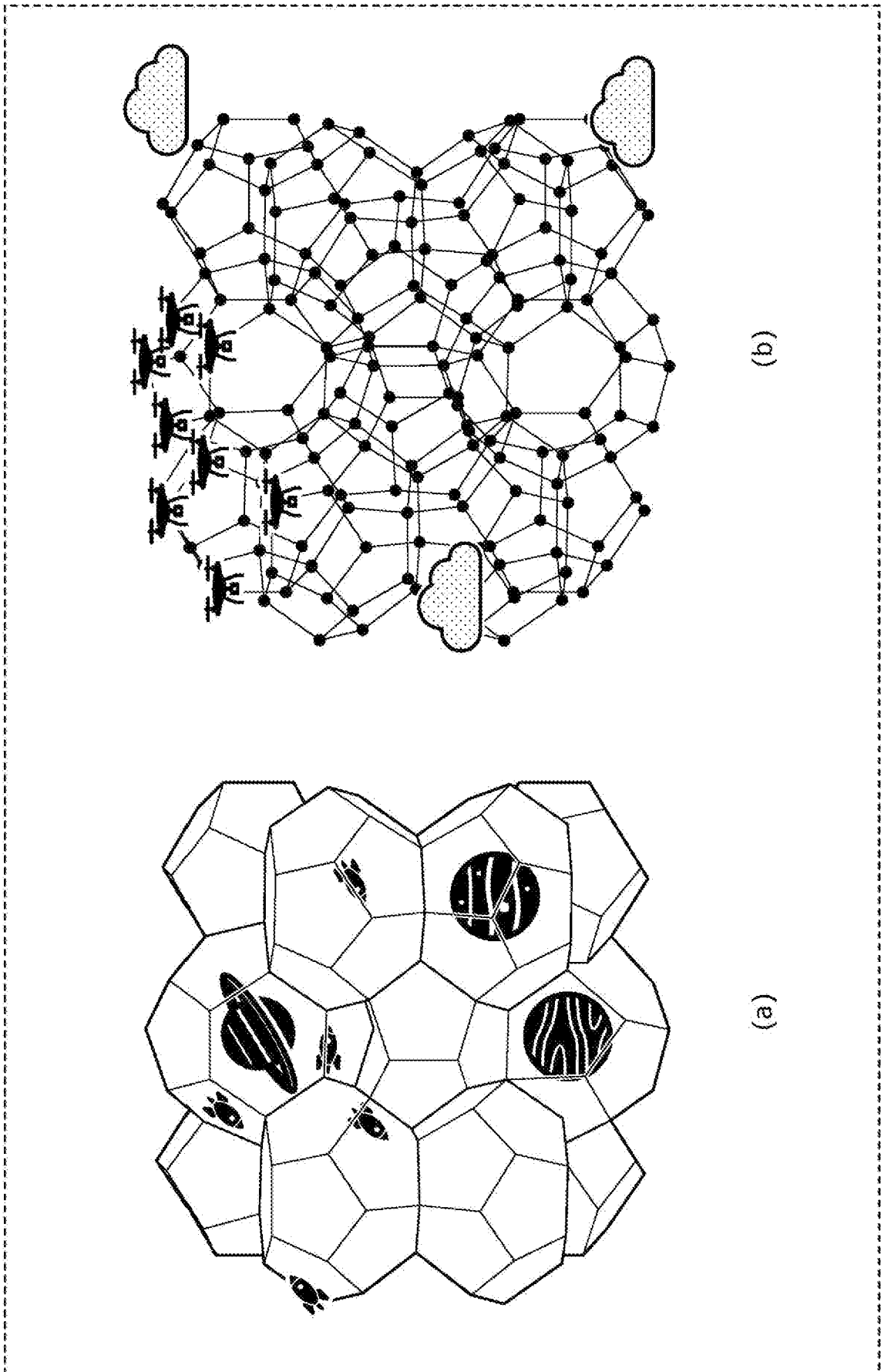
[図42]



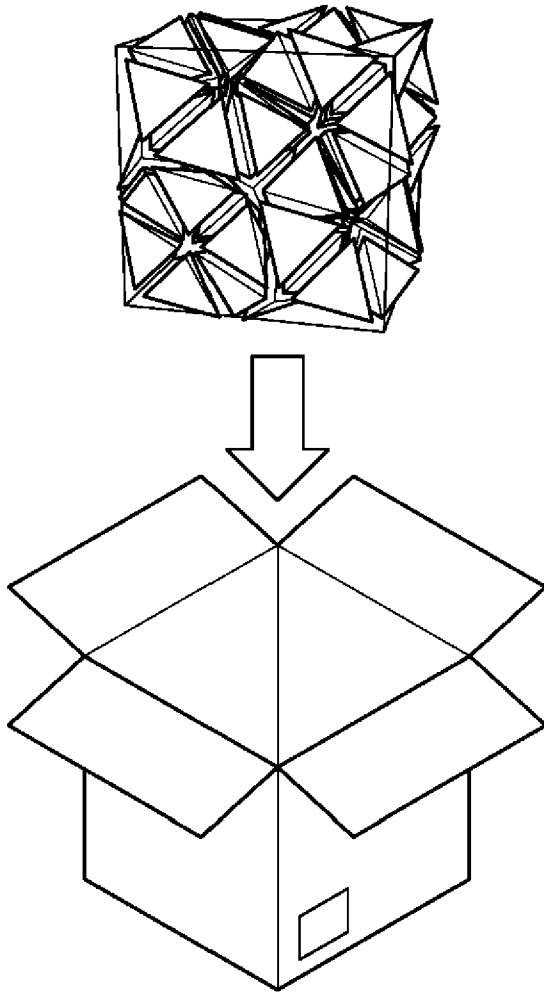
[図43]



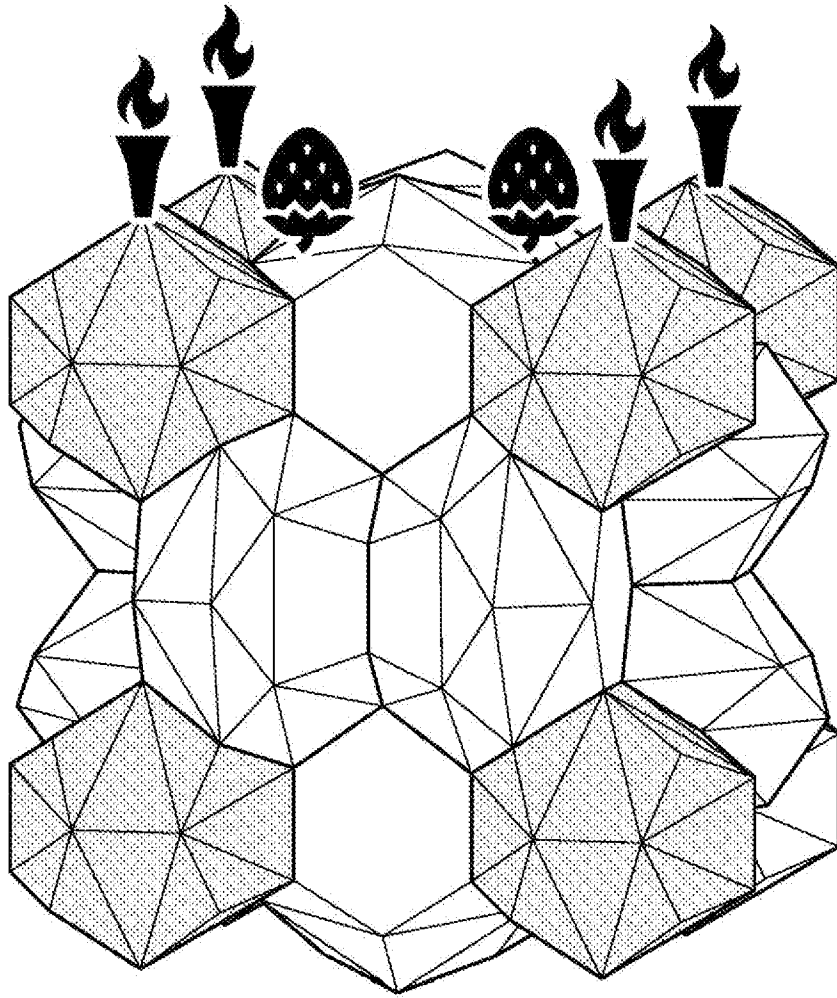
[図44]



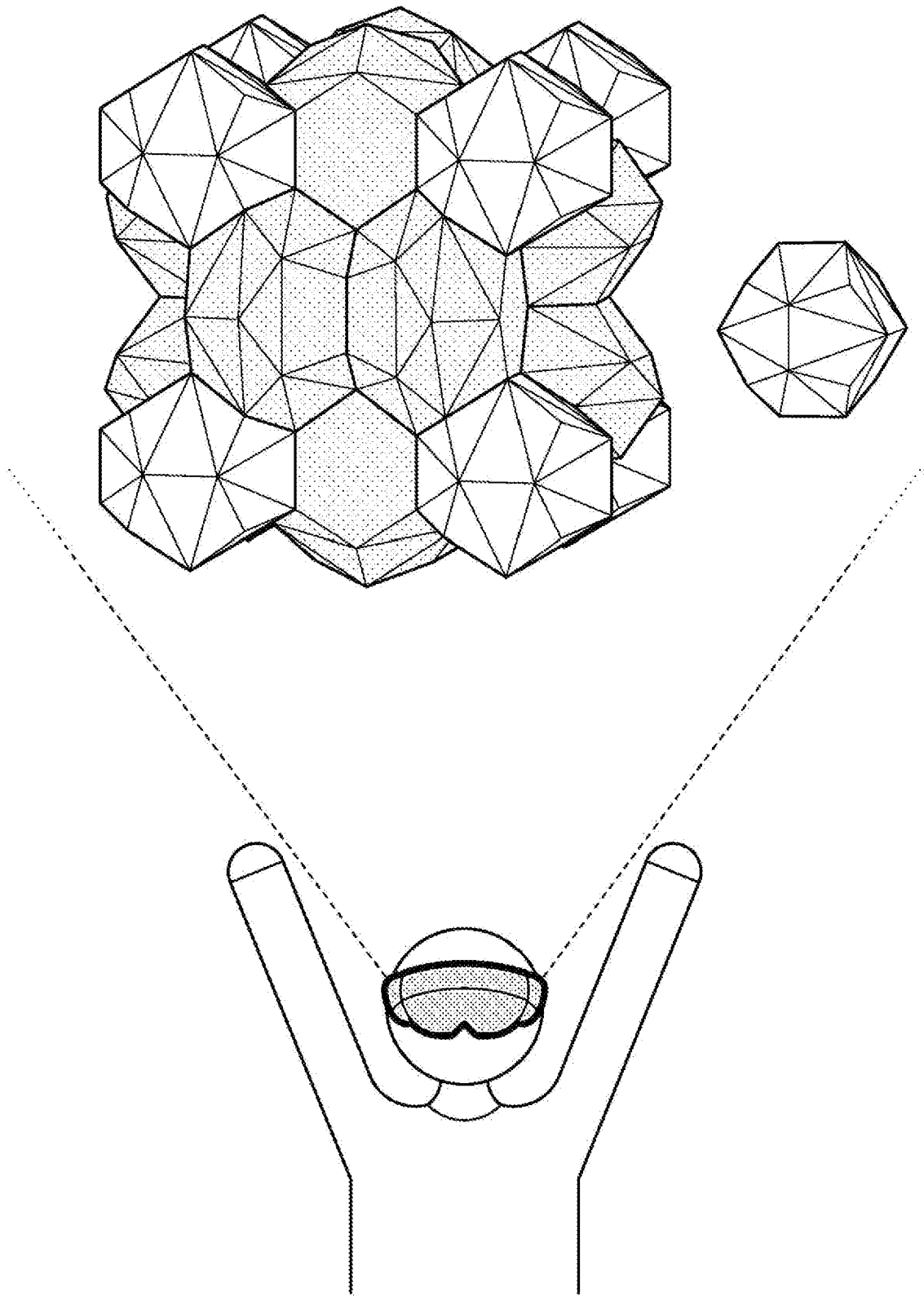
[図45]



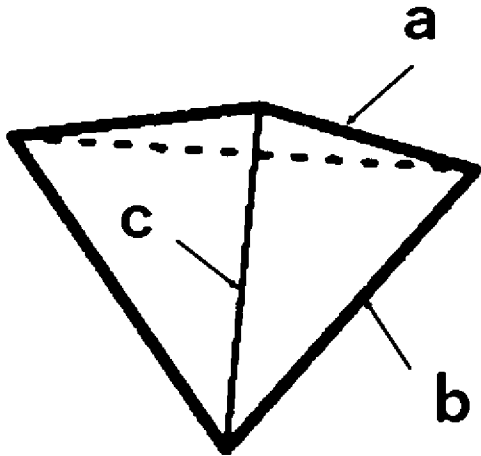
[図46]



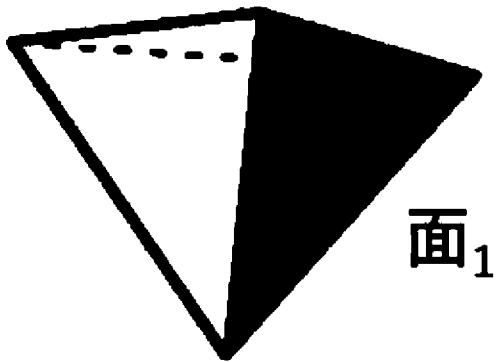
[図47]



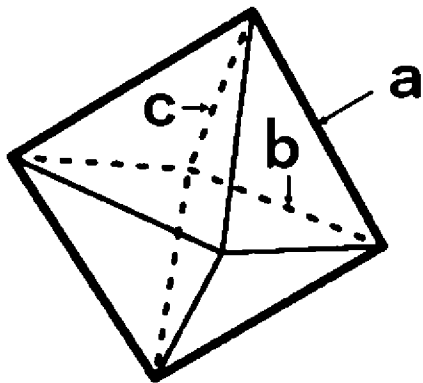
[圖48]



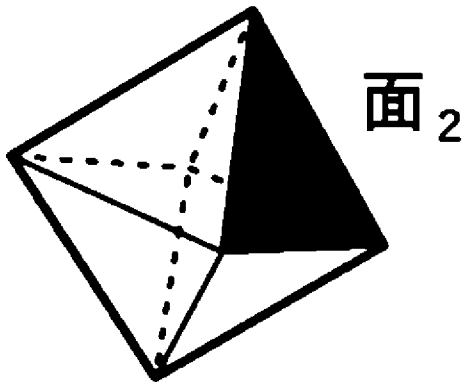
[圖49]



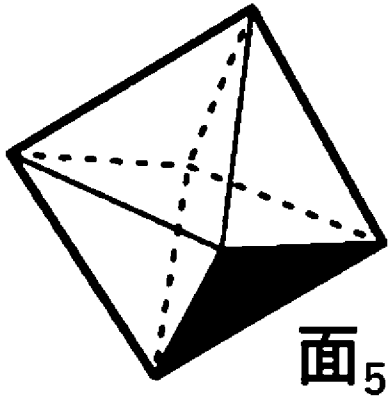
[圖50]



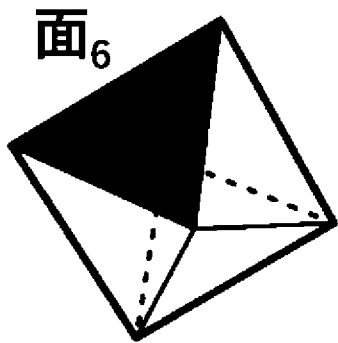
[図51]



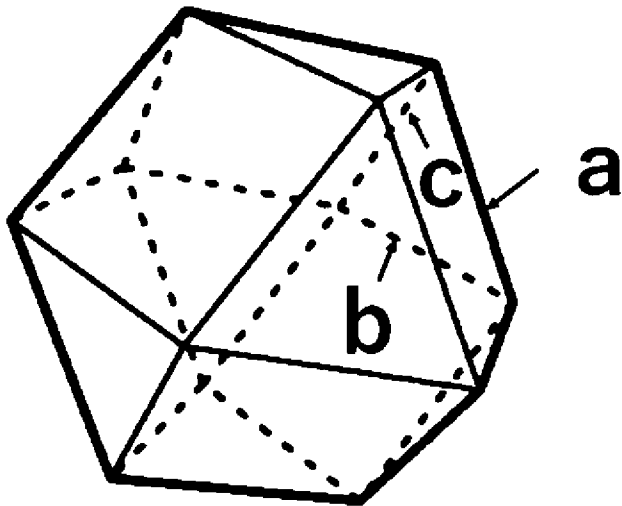
[図52]



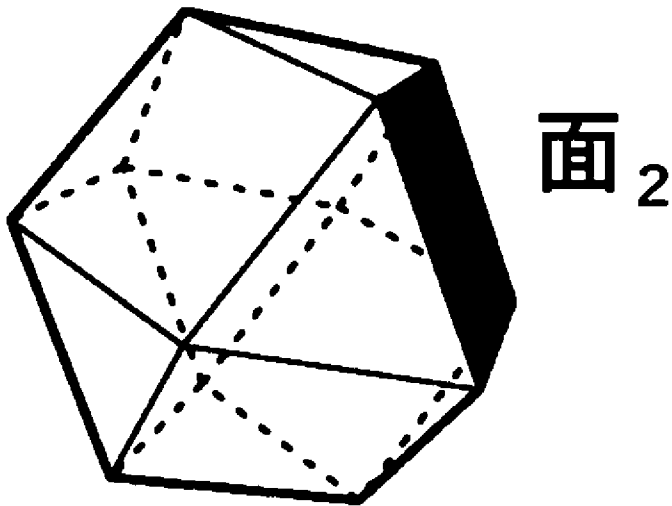
[図53]



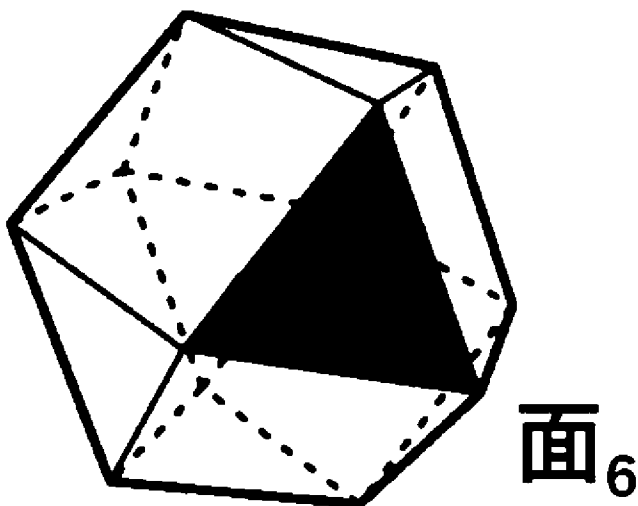
[図54]



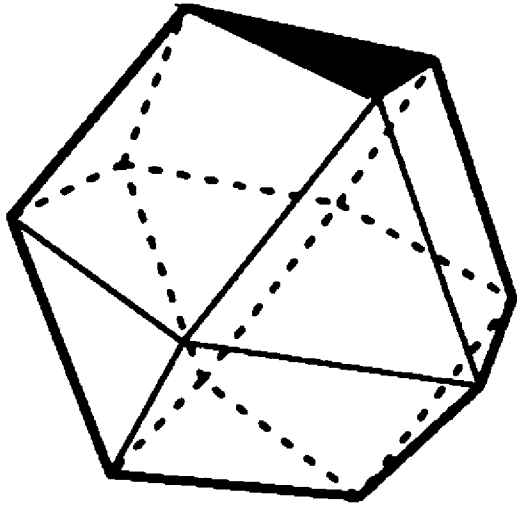
[図55]



[図56]



[図57]

面<sub>7</sub>

## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/001944

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
G16C 20/40(2019.01); FI: G16C20/40		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
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 1971-2023 Registered utility model specifications of Japan 1996-2023 Published registered utility model applications of Japan 1994-2023		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CrystalMaker: Overview, [online], 22 January 2022, pages 1-15, [retrieved on 22 February 2023], <URL:https://web.archive.org/web/20220122203156/http://crystallmaker.com/crystallmaker/index.html> pages 1-15	1, 11, 13
Y	pages 1-15	2-5, 8-10, 12
A	entire text, all drawings	6-7
Y	Building a New Crystal, YouTube [online][video], 31 July 2018, particularly, play time 0:00-3:54, [retrieved on 03 March 2023], <URL:https://www.youtube.com/watch?v=AnYD0ERAFJw> particularly, play time 0:00-3:54	2-5, 8-10, 12
Y	Crystal Viewer: Introduction, [online], 29 December 2021, pages 1-11, [retrieved on 16 February 2023], <URL:https://web.archive.org/web/20211229165639/http://crystallmaker.com/crystalviewer/index.html> pages 1-11	4-5, 8-10, 12
A	JP 2020-106483 A (NIPPON STEEL CORP.) 09 July 2020 (2020-07-09) entire text, all drawings	1-13
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> 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 "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 <b>03 March 2023</b>		Date of mailing of the international search report <b>14 March 2023</b>
Name and mailing address of the ISA/JP <b>Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan</b>		Authorized officer  Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
**Information on patent family members**

International application No.

**PCT/JP2023/001944**

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2020-106483	A	09 July 2020	(Family: none)

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G16C 20/40(2019.01)i FI: G16C20/40		
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 - 2023年 日本国実用新案登録公報 1996 - 2023年 日本国登録実用新案公報 1994 - 2023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
X	CrystalMaker: Overview, [online], 2022.01.22, Pages 1-15, [検索日: 2023年2月22日], <URL:https://web.archive.org/web/20220122203156/http://crystallmaker.com/crystallmaker/index.html> 1-15ページ	1,11,13
Y	1-15ページ	2-5,8-10,12
A	全文、全図	6-7
Y	Building a New Crystal, YouTube [online][video], 2018.07.31, 特に再生時間0:00-3:54, [検索日: 2023年3月3日], <URL:https://www.youtube.com/watch?v=AnYDOERafJw> 特に再生時間0:00-3:54	2-5,8-10,12
Y	Crystal Viewer: Introduction, [online], 2021.12.29, Pages 1-11, [検索日: 2023年2月16日], <URL:https://web.archive.org/web/20211229165639/http://crystallmaker.com/crystalviewer/index.html> 1-11ページ	4-5,8-10,12
A	JP 2020-106483 A (日本製鉄株式会社) 09.07.2020 (2020 - 07 - 09) 全文、全図	1-13
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> 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、一般的な技術水準を示すもの “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 03.03.2023	国際調査報告の発送日 14.03.2023	
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	

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/JP2023/001944

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2020-106483 A	09.07.2020	(ファミリーなし)	