

アドバンス・シミュレーション 第2回 ・セミナー 2021

2021年 8 月 20 日 (金) 開催

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
- 招待講演
「先進的材料計測データへの機械学習手法の活用」 3
日本原子力研究開発機構 J-PARC センター
物質・生命科学実験施設ディビジョン
共通技術開発セクション
研究主幹 巽 一蔵 様
3. アドバンスソフトからの情報提供 23

講演概要

「先進的材料計測データへの機械学習手法の活用」

日本原子力研究開発機構 J-PARC センター 研究主幹 巽 一蔵 様

計測技術の進展により、材料分析での各種分光で得られるデータも大規模化・高精度化してきており、実験データの質・量の向上とともに、データ科学的手法も活用されるようになってきている。例えば走査透過型電子顕微鏡に付随した電子線エネルギー損失分光においては、試料の 2 次元平面上の 100 x 100 点からの 1000 チャンネルほどのスペクトルが 1 時間もかからず取得できる。

パルス中性子源での非弾性散乱では、逆格子単位胞全体および散乱対象が存在するエネルギー範囲全体で、個々の散乱を全て記録できる。これらを対象としてデータ科学的手法を適用した例を紹介する。

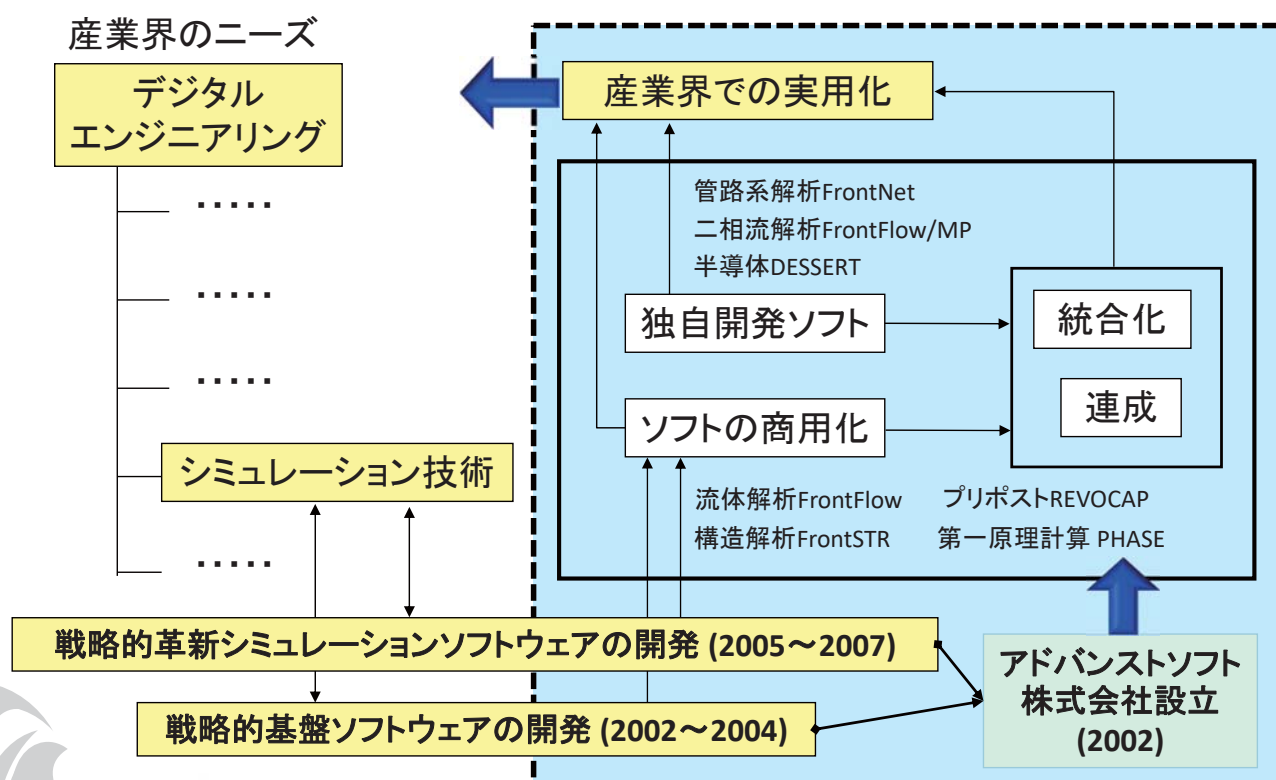
アドバンスソフト株式会社のご紹介

第2回 アドバンス・シミュレーション・セミナー 2021

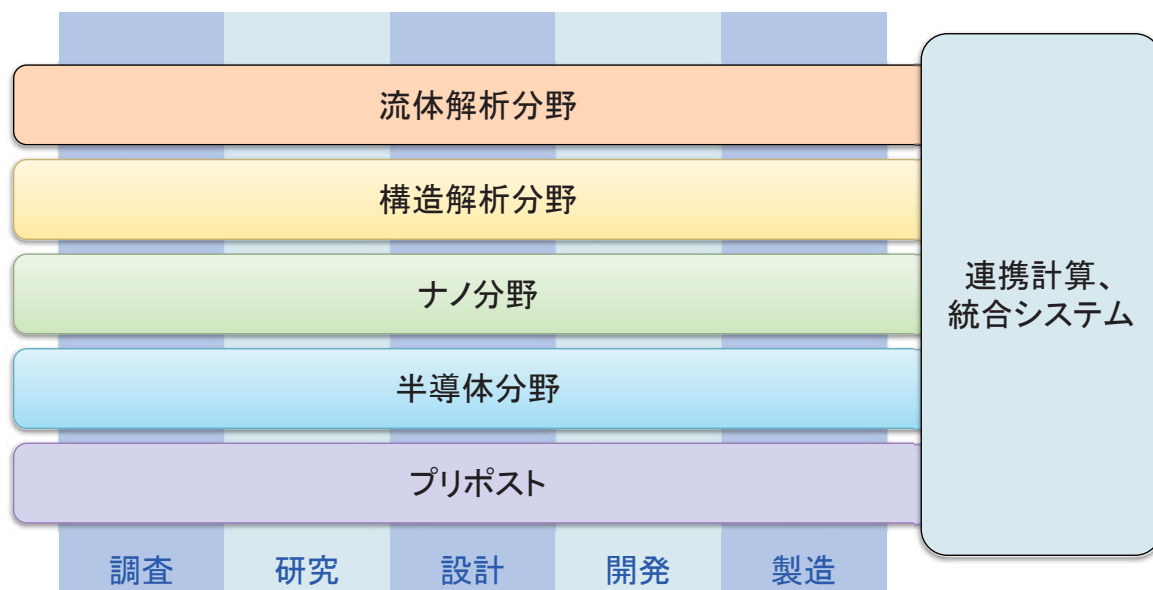
2021年8月20日（金）開催

アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、
科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE 密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。 ナノ材料 GUI 付属	ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo 材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。 ナノ材料 プリポスト	流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red 非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3 次元流体解析ソフトウェアです。 流体	圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i 非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に超音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。 流体
大規模 3 次元 TCAD システム Advance/TCAD 超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3 次元 TCAD システムです。 半導体デバイス GUI 付属	ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。 ナノ材料 AI・機械学習	気液二相流解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP 沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3 次元で解析するソフトウェアです。 流体	管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet 配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1 次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。 流体 GUI 付属
大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave マクスウェル方程式を FDTD 法で 3 次元的に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。 光波・電磁波	構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR 固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。 構造	大気拡散影響予測システム Advance/Emerg 大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。 流体 GUI 付属	深層学習ツール Advance/iMacLe 機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限の機能に絞った比較的軽いツールです。 AI・機械学習
汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP 解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。 プリポスト	音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise 環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3 次元で解析するソフトウェアです。 音響	自社による開発（国プロ含む） 開発チームによる質の高いサポートサービス カスタマイズや機能追加も応相談 並列数無制限（追加料金なし）	

先進的材料計測データへの機械学習手法の活用

日本原子力研究開発機構

巽 一蔵

自己紹介

巽 一蔵 研究分野： 理論計算と分光実験による材料解析

学歴

1998 京都大学工学部物理工学科卒業
2000 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻修士課程修了
2002 京都大学大学院工学研究科材料工学専攻博士課程修了

職歴

2002-2003 日本学術振興会特別研究員
2003-2012 名古屋大学大学院工学研究科助手・助教・講師
2012-2013 名古屋大学大学院工学研究科准教授
2013-2016 名古屋大学エコトピア科学研究所准教授
2016-2019 名古屋大学未来材料システム研究所准教授
2019- 日本原子力研究開発機構研究主幹@J-PARC MLF

分子軌道計算
分子動力学計算
バンド計算

X線吸収分光
電子線エネルギー損失分光

中性子散乱
データ駆動サイエンス

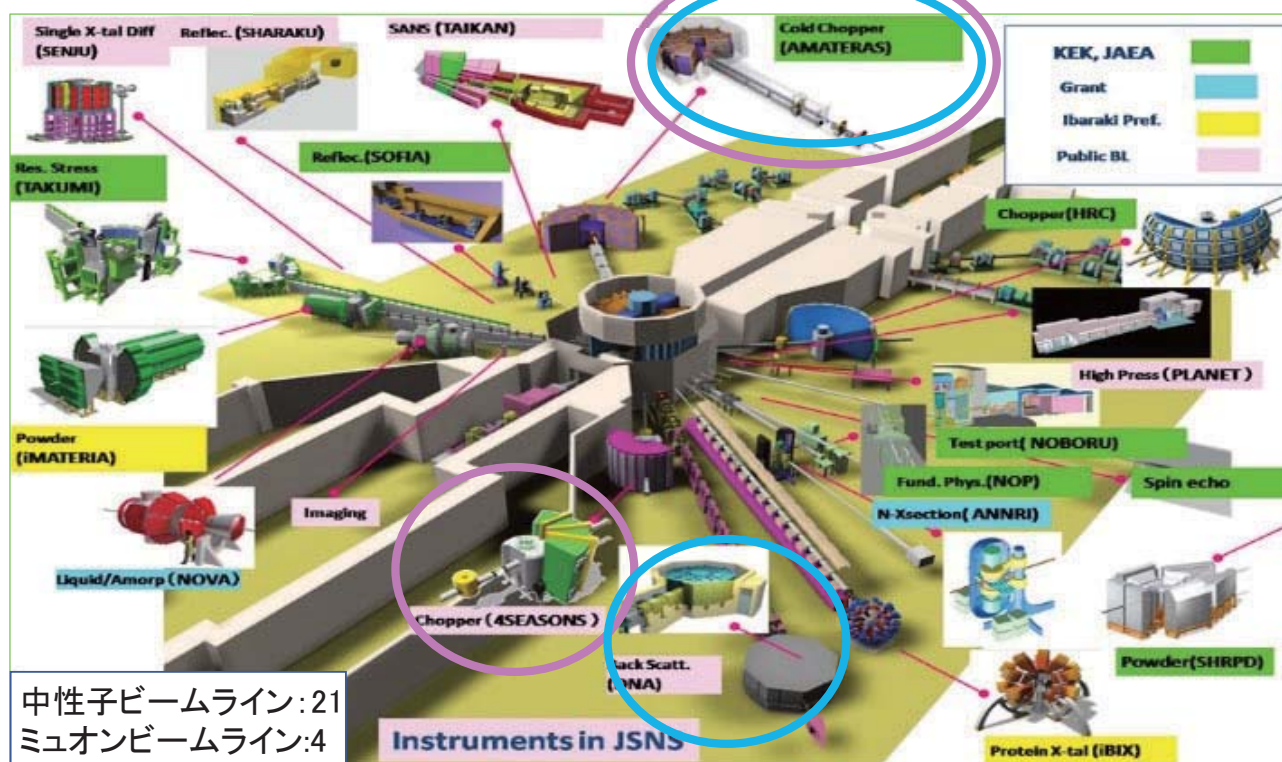
計算でよく設計した材料分析実験



MLFの実験ビームライン

非弾性中性子散乱

準弾性散乱



Arai (2014)

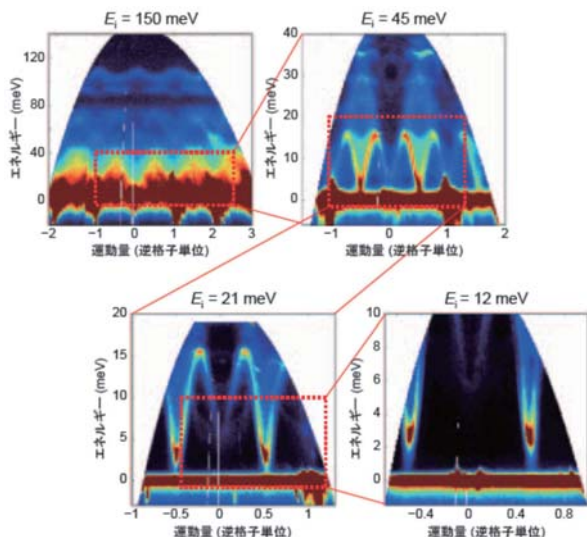
MLFの実験データで何がわかるか

https://mlfinfo.jp/_src/resource/PEPngy9XwF/MLF_spec_2020j.pdf

非弾性中性子散乱

スピン・原子・分子の運動状態
運動量・エネルギーの変化(q, E)で観測

- ・結晶の磁気や原子振動の構造がわかる
- ・水素などの軽元素の結合状態がわかる

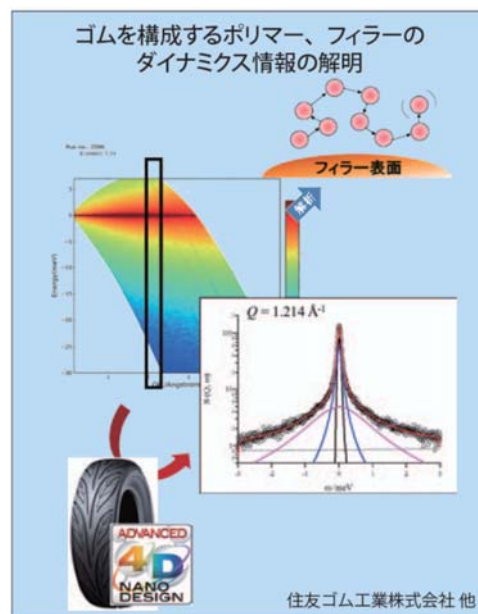


複数の入射エネルギー (E_i) を同時に用いて測定された CuGeO_3 の励起スペクトル

準弾性中性子散乱

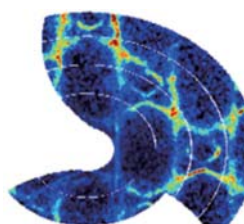
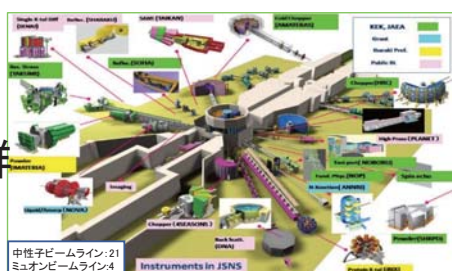
散乱体の時空相関を(q, E)で観測

原子や分子の拡散・緩和的な運動
の時空間スケールが分かる

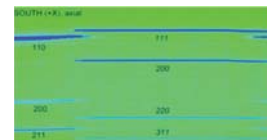


MLFでのデータ駆動サイエンス

MLF装置群



高度計測データ



弾性領域を含む広範な散乱強度分布取得能＋統一データフォーマット



先進計算環境
解析ファクトリー

- ・高速通信
- ・データ貯蔵・検索・提供
- ・高精度シミュレータ
- ・機械学習器

先進計算環境のソフト面・ハード面の拡充に基づく
データ駆動サイエンスを推進

データの効率的取得及び解析対象物の超解像化

実施課題数を増大、解析時間の短縮化、異分野融合促進等を実現

発表内容

1. ポアソン統計を用いた確率密度推定:ヒストグラム

中性子非弾性散乱ヒストグラム最適ビン巾

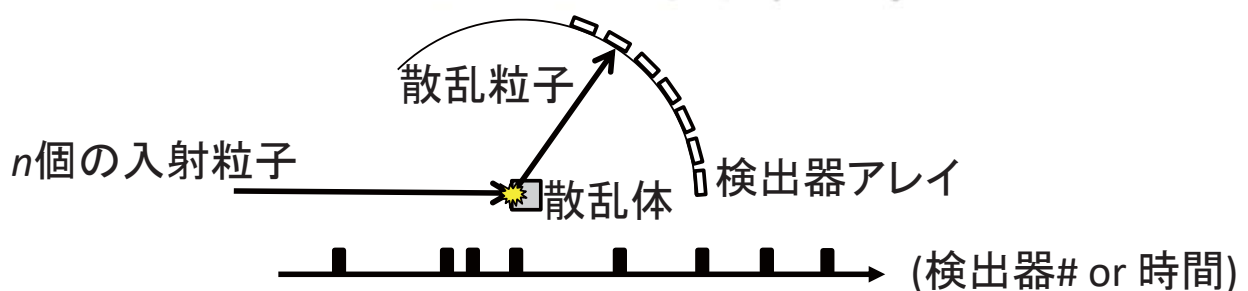
2. ポアソン統計を用いた確率密度推定:カーネル

中性子準弾性散乱確率密度推定

3. 多数データによるスペクトル成分の解析

電子顕微鏡での電子分光の多変量解析

J-PARC MLFでのデータ



✓ イベントデータ(リスト形式)

個々の中性子検出をイベントとして記録

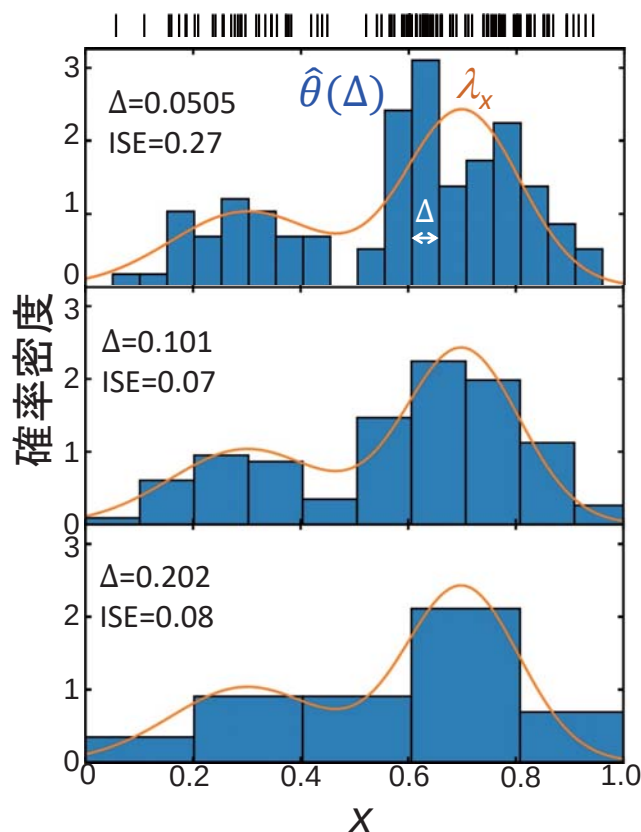
✓ データリダクション(通常はヒストグラム形式)

無劣化でビン巾を変えることが可能

✓ イベント系列はポアソン点過程と近似できる

ある検出器領域のイベント数
ポアソン分布に従う

ヒストグラムによる確率密度推定



$\{x_1, \dots, x_n\}$: 点過程(計測データ)

ヒストグラムの高さ: $\hat{\theta}(\Delta) = \frac{k}{n\Delta}$
 k : ビン内点数, n : 総点数, Δ : ビン幅

最適 Δ の指標:

平均積分二乗誤差(MISE)

$$\equiv \frac{1}{X} \int_0^X E(\hat{\theta} - \lambda_x)^2 dx$$

E : I_x で生じる点過程の期待値

ヒストグラムのビン巾

Shimazakiら(2007)

1. ポアソン点過程におけるヒストグラムビン巾最適化法
2. 望みの解像度を得るのに必要な計測時間予測可能

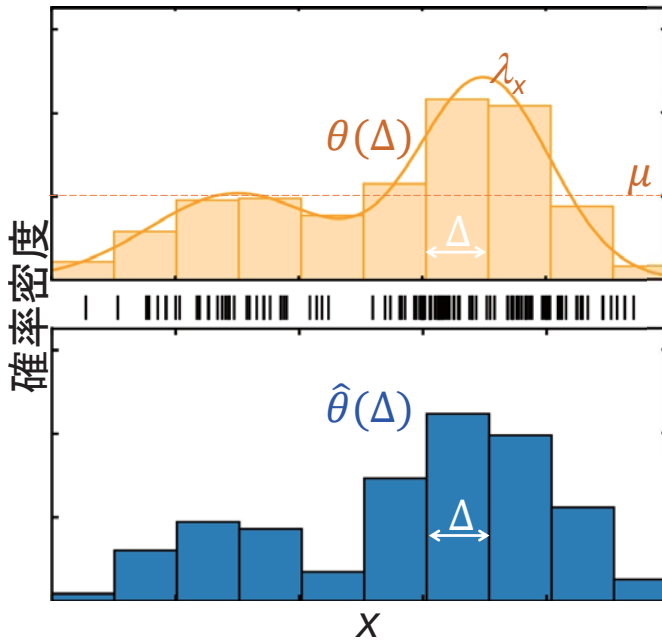
Mutoら(2019)

3. 1.を多次元に拡張→中性子非弾性散乱模擬データ

中性子実験データでの最適化・予測例: **ない**

目的: 中性子非弾性散乱実験ヒストグラムビン巾
 $(\Delta_{qx}, \Delta_{qy}, \Delta_{qz}, \Delta_E)$ の最適化・予測

コスト関数



$$MISE \equiv \frac{1}{X} \int_0^X E(\hat{\theta} - \lambda_x)^2 dx$$

$$\sim \frac{1}{T} \int_0^T (\lambda_x - \mu)^2 dt + \frac{2\bar{k} - v}{n^2 \Delta^2}$$

$\bar{k}$: ビン内のカウント数の平均

v : ビン内のカウント数の分散

個々のビンの k がポアソン分布

$$p(k|n\Delta\theta) = \frac{(n\Delta\theta)^k}{k!} e^{-n\Delta\theta}$$

$$\text{mean: } Ek = n\Delta\theta$$

$$\text{variance: } E(k - E(k))^2 = n\Delta\theta$$

$$\hat{C}_n(\Delta) = \frac{2\bar{k} - v}{(n\Delta)^2}$$

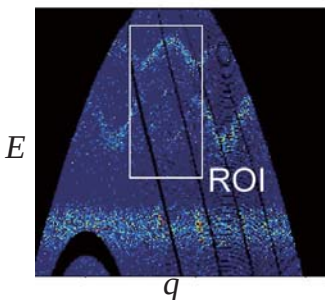
$$\hat{C}_m(\Delta|n) = \left(\frac{1}{m} - \frac{1}{n}\right) \frac{1}{\Delta} \bar{k} - \hat{C}_n$$

$$\Delta^{*(n)} = \underset{\Delta}{\operatorname{argmin}} \hat{C}_n(\Delta)$$

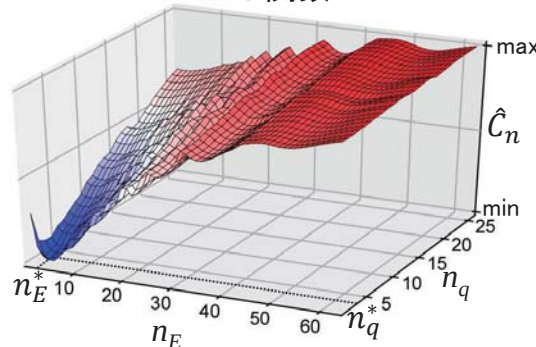
$$\Delta^{*(m|n)} = \underset{\Delta}{\operatorname{argmin}} \hat{C}_m(\Delta|n)$$

最適化手順(2Dデータの場合)

入力:
初期微細ヒストグラム
ビン巾: $\Delta_E^{ini}, \Delta_q^{ini}$
全計数: n



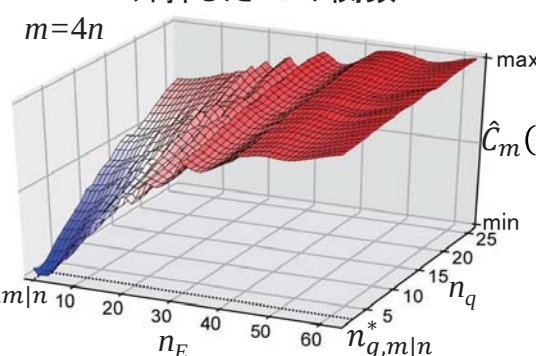
コスト関数



最適ビン巾

$$n_E^* \Delta_E^{ini}, n_q^* \Delta_q^{ini}$$

外挿したコスト関数



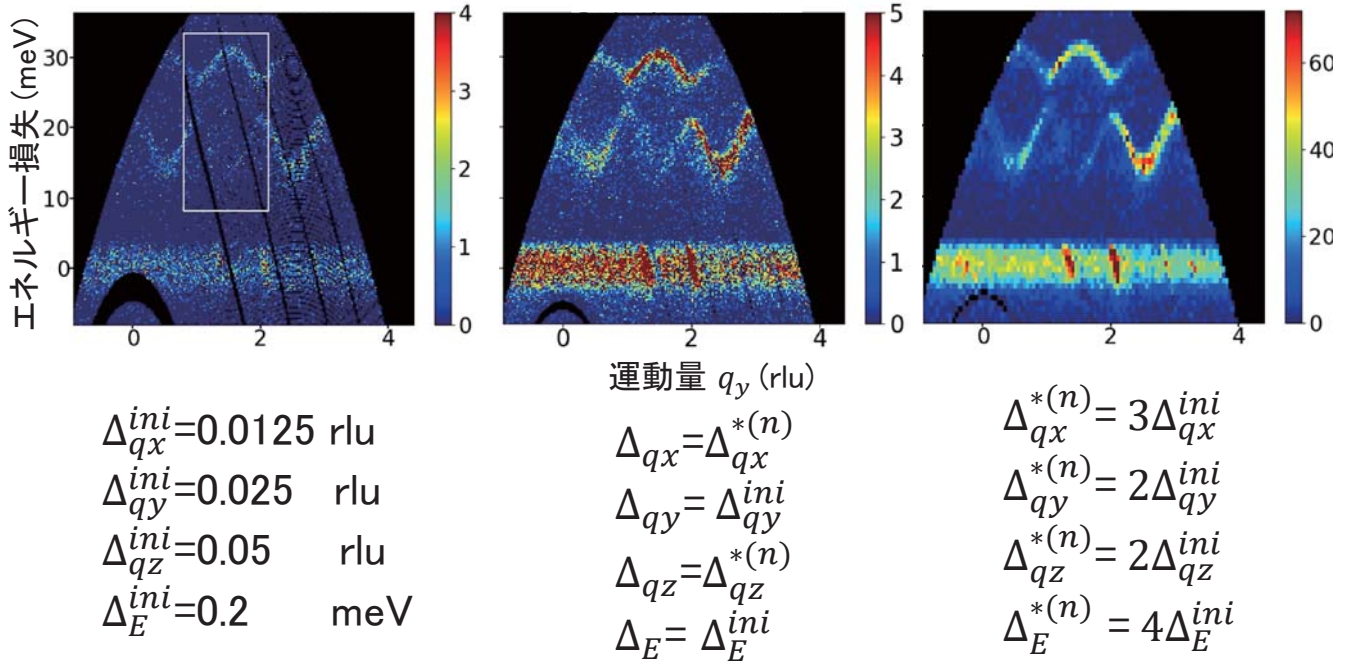
外挿した最適ビン巾

$$n_{E,m|n}^* \Delta_E^{ini}, n_{q,m|n}^* \Delta_q^{ini}$$

結果例

試料: 単結晶 Cu

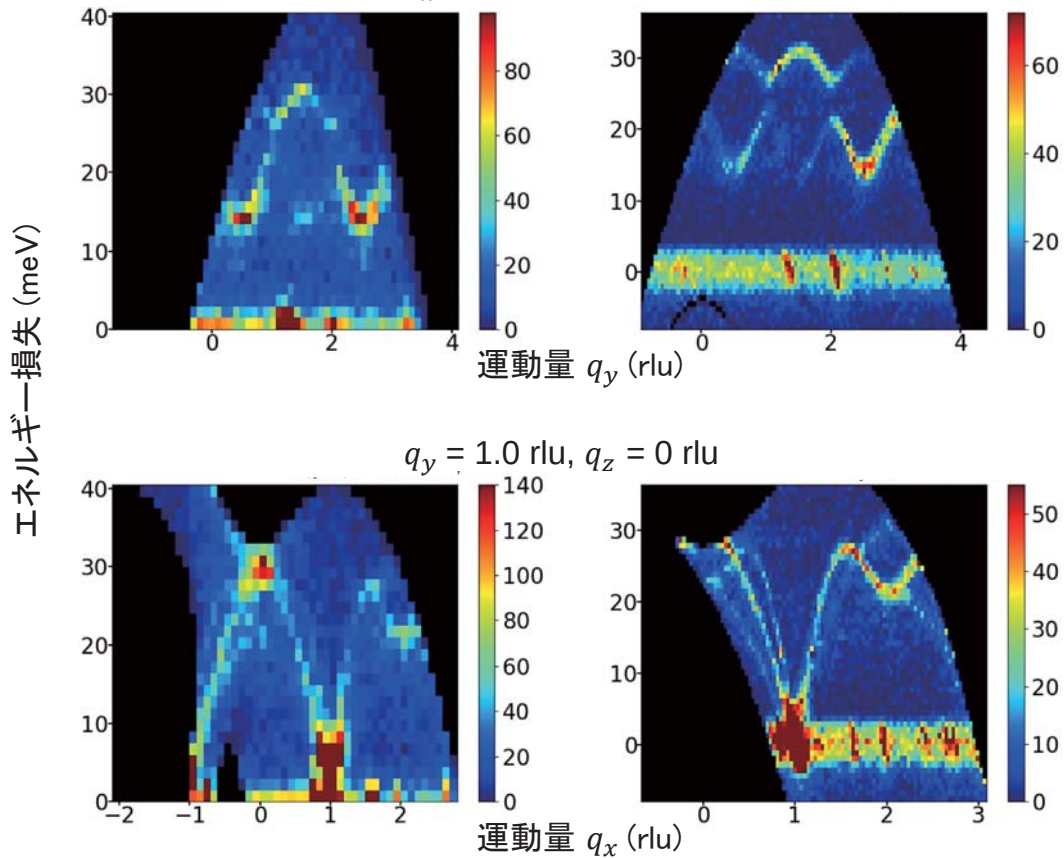
$q_x = 1.5$ rlu, $q_z = 0$ rlu



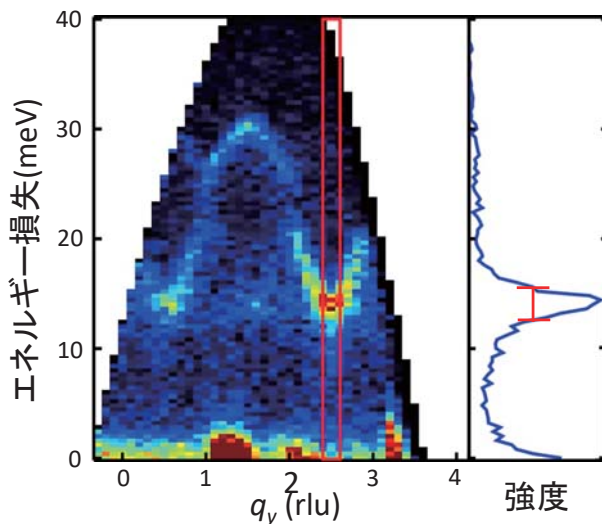
異なる品質のデータでの比較

試料: 単結晶 Cu

$q_x = 1.5$ rlu, $q_z = 0$ rlu



エネルギー分解能との比較

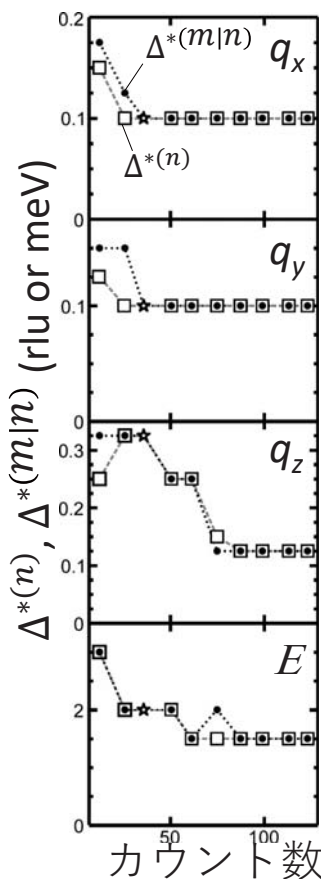


$\Delta_E^{*(n)}$: FWHMより小さい値

→ FWHMでのエネルギー分解能測定と矛盾しない

実験 #	#1	#2	#3
FWHM $\pm \Delta_\omega$ (meV)	3 ± 0.4	3 ± 0.2	0.5 ± 0.08
$\Delta_E^{*(n)}$ (meV)	1.5	0.8	0.32

異なるカウント数への外挿

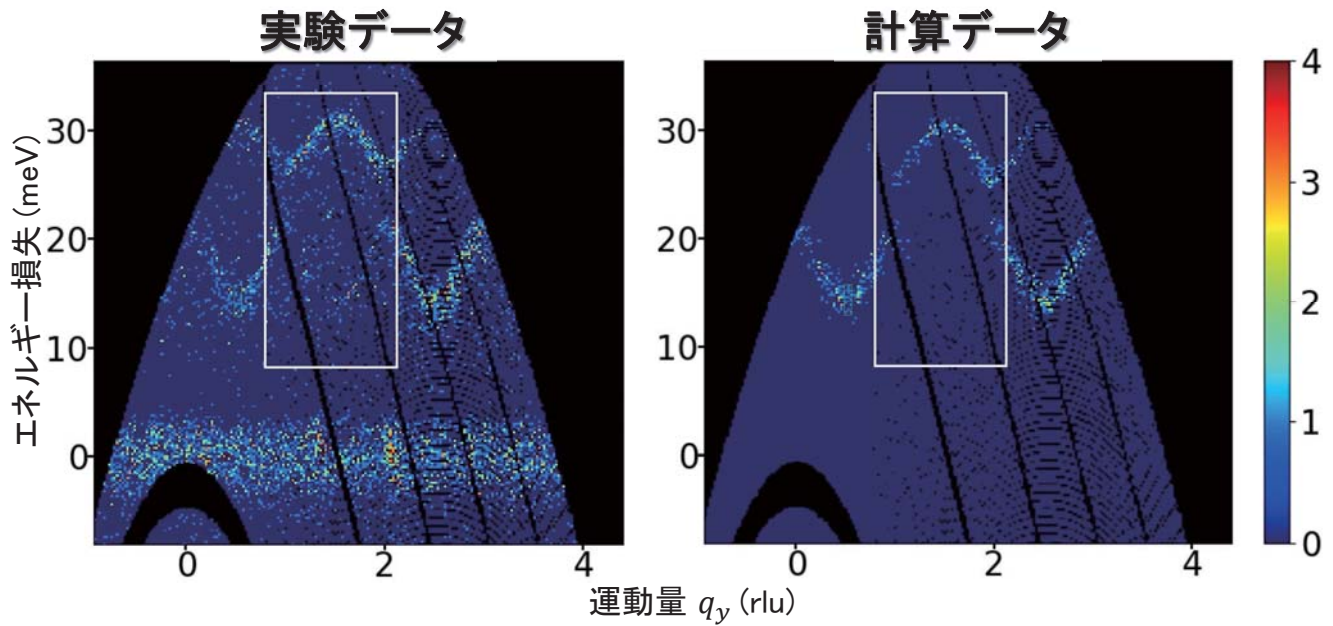


☆からの外挿 $\Delta^{*(m|n)}$ により、
個々のデータでの最適 $\Delta^{*(n)}$ を予測可能

実験終了の判断材料

解の収束性の検証①

計算での確率密度・模擬データを用いて最適ビン巾の収束性を検証



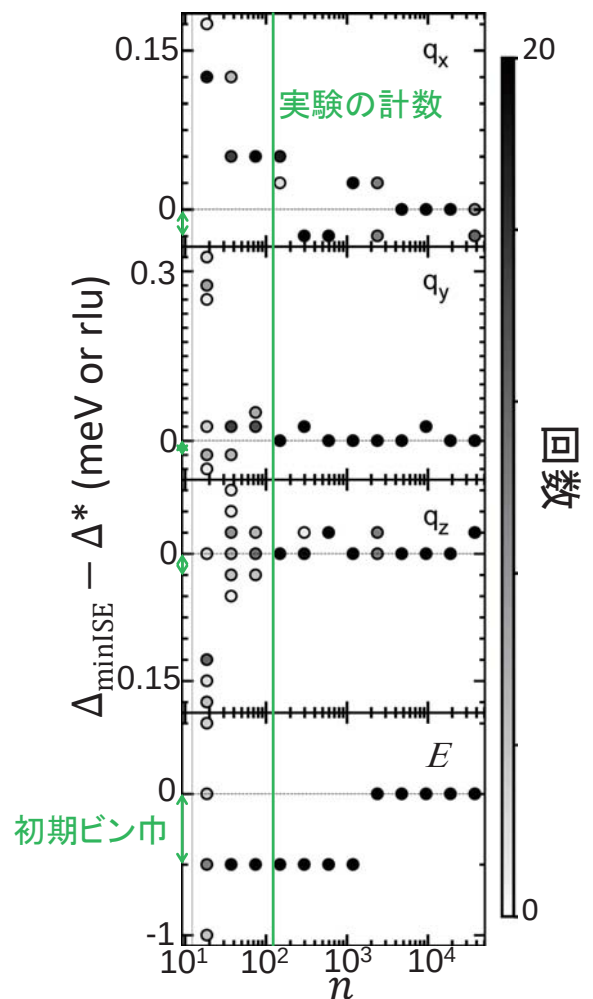
解の収束性の検証②

カウント数あたり20セットの模擬データ

$$\Delta_{\min\text{ISE}}^{*(n)} = \operatorname{argmin}_{\Delta} \frac{1}{V} \int_V (\hat{\theta}_n(\Delta) - \lambda_v)^2 dV$$

$$\Delta^{*(n)} = \operatorname{argmin}_{\Delta} \hat{C}_n(\Delta)$$

2初期ビン巾内に収束



発表内容

1. ポアソン統計を用いた確率密度推定:ヒストグラム

中性子非弾性散乱ヒストグラム最適ビン巾

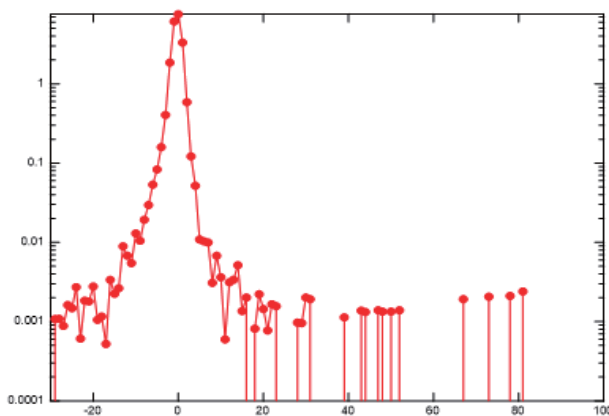
2. ポアソン統計を用いた確率密度推定:カーネル

中性子準弾性散乱確率密度推定

3. 多数データによるスペクトル成分の解析

電子顕微鏡での電子分光の多変量解析

中性子実験データ@準弾性散乱



強度のダイナミックレンジ大

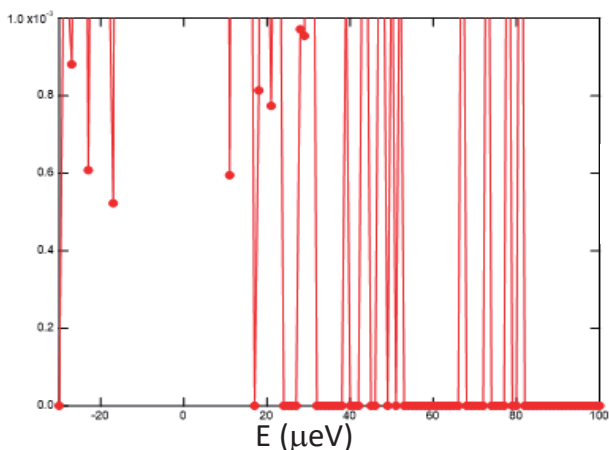
ヒストグラムのビン巾

低カウント領域の

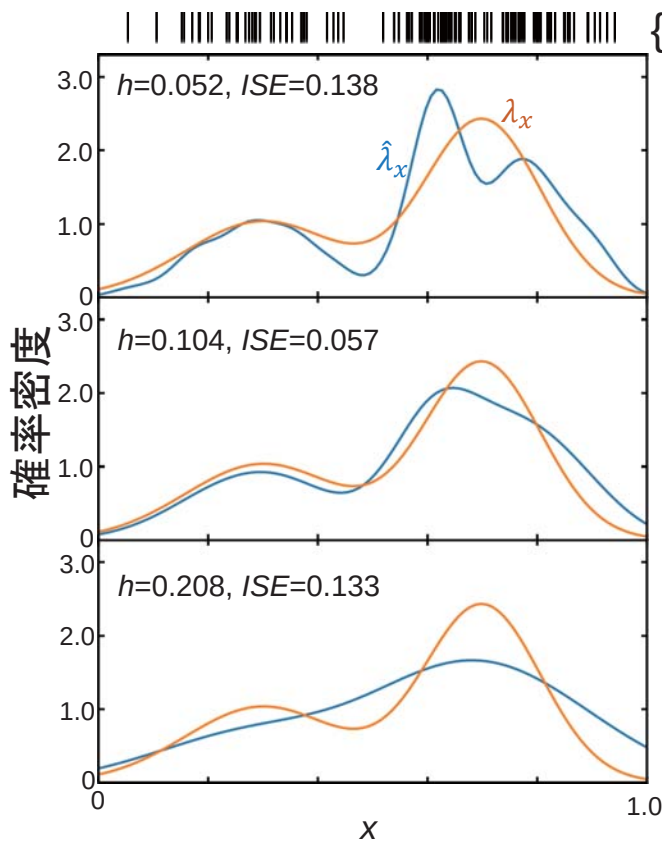
バックグラウンドを決めてしまう



局所可変カーネル密度推定の適用



カーネル密度推定



$\{x_1, \dots, x_n\}$ 点過程 (計測データ)

$$\hat{\lambda}_x = \sum_{i=1}^n k(x - x_i)$$

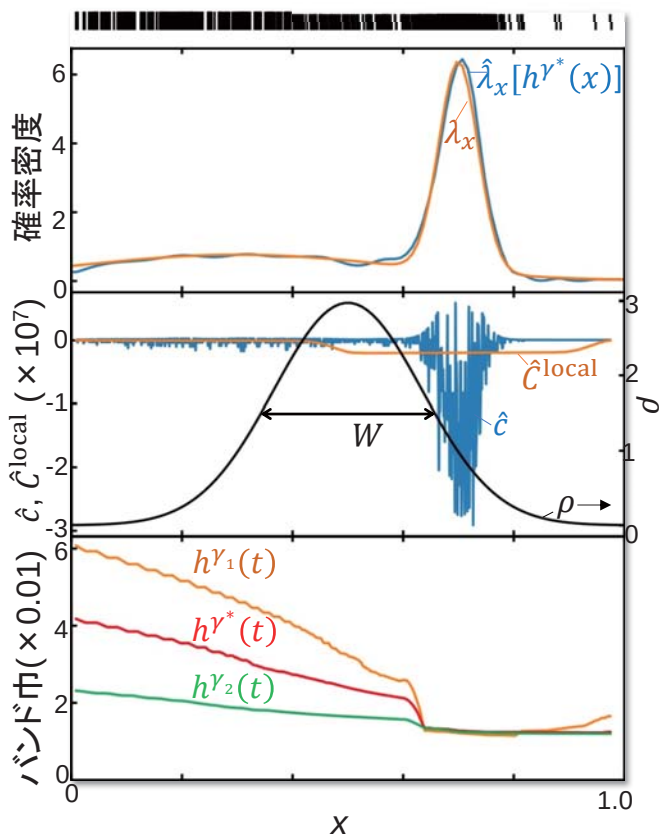
$$k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}h} \exp\left(-\frac{x^2}{2h^2}\right)$$

$$MISE = \frac{1}{X} \int_0^X (\hat{\lambda}_x - \lambda_x)^2 dx$$

ビン巾と同様にバンド巾 h の決め方が誤差を左右

Shimazakiら(2010)

局所可変カーネル密度推定



コスト関数は t の積分の形

$$C[h] = \int_0^X \hat{c}(x, h) dx$$

→窓関数 $\rho(x, W)$ で局所化

全ての W, x において

$$\begin{aligned} h^*(W, x) &= \operatorname{argmin}_h \int \rho(x - x', W) \hat{c}(x, h) dx' \\ &= \operatorname{argmin}_h \hat{c}^{\text{local}}(x, h, W) \\ \gamma &= h^*/W \text{ 大} \rightarrow h^* \text{ は } x \text{ に関し大きく変化} \end{aligned}$$

全ての γ において

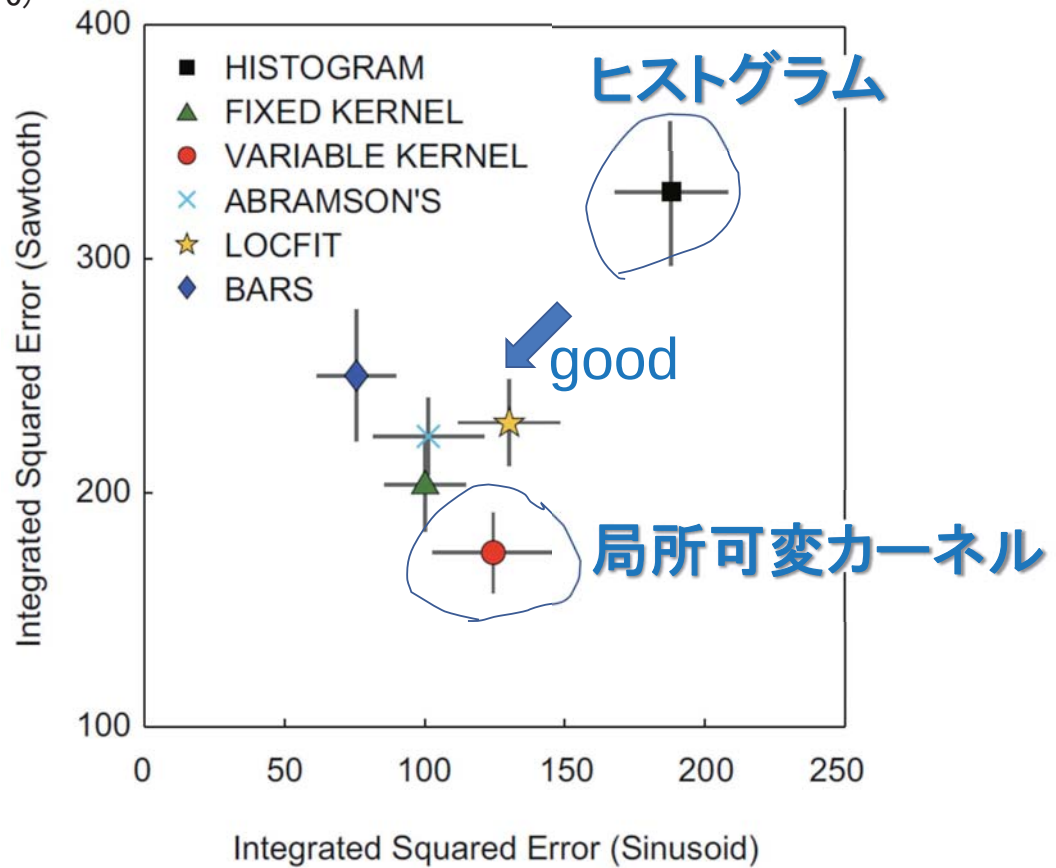
平滑化

$$h^\gamma(x) = \frac{\int h^*(x, \gamma) \rho(x - x', W(x', \gamma)) dx'}{\int \rho(x - x', W(x', \gamma)) dx'}$$

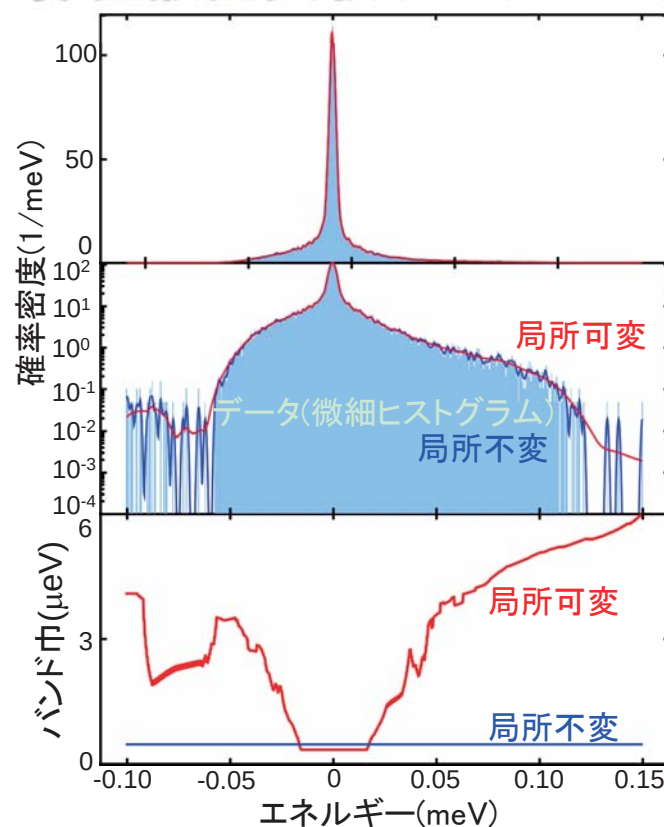
$$\gamma^* = \operatorname{argmin}_\gamma C[h^\gamma]$$

ヒストグラムとの比較

Shimazakiら(2010)

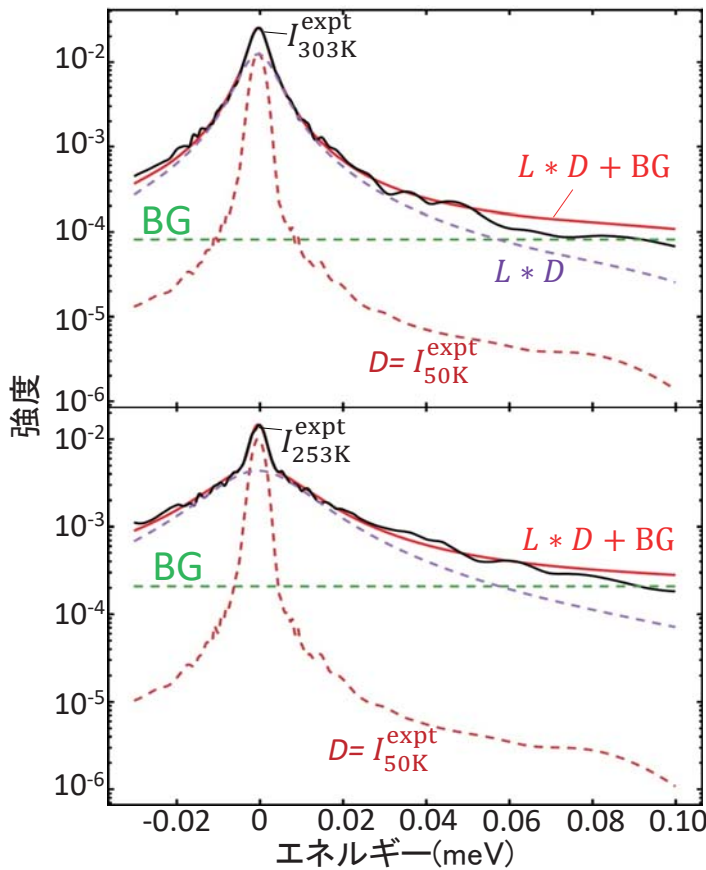


準弾性散乱実験データへの適用例



スムーズな密度をデータ駆動的に推定

フィッティング解析例



$$I^{\text{expt}} \sim L * D + BG$$

$$L = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{E^2 + \Gamma^2}$$

T (K)	Γ (meV)	
	局所可変 カーネル	ヒストグラム
303	0.0123 ± 0.00012	0.0124 ± 0.00033
253	0.0039 ± 0.00003	0.0039 ± 0.00008

フィッティングによる不確かさ低減

発表内容

1. ポアソン統計を用いた確率密度推定:ヒストグラム

中性子非弾性散乱ヒストグラム最適ビン巾

2. ポアソン統計を用いた確率密度推定:カーネル

中性子準弾性散乱確率密度推定

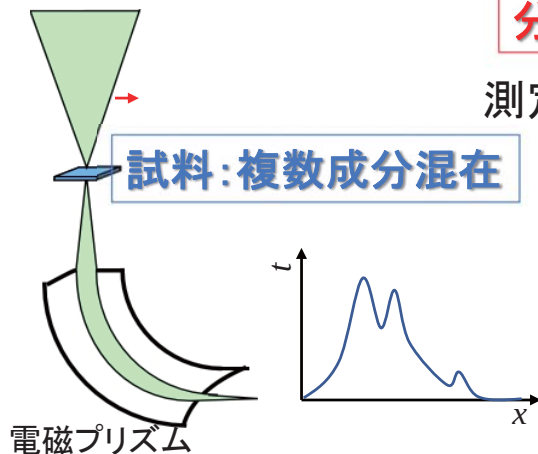
3. 多数データによるスペクトル成分の解析

電子顕微鏡での電子分光の多変量解析

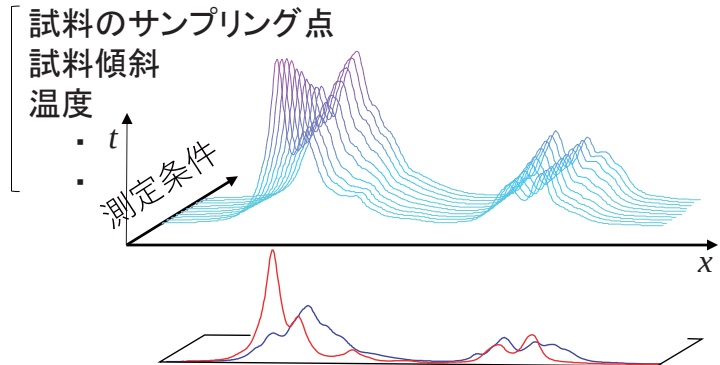
多数のスペクトルデータからの有意成分抽出

電子顕微鏡の電子分光等

個々の実験スペクトルに含まれる純粋成分スペクトルとその重みを得たい



測定条件の異なるデータ



仮定: 個々の実験スペクトル~成分スペクトルの線形結合

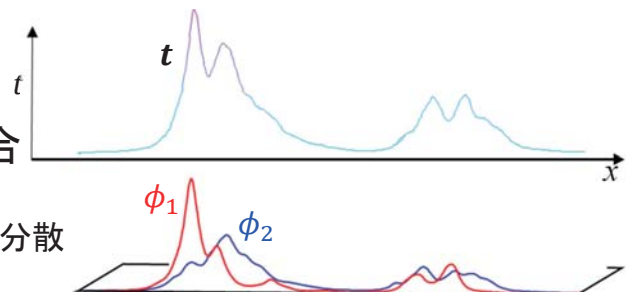
最小二乗誤差①

成分スペクトルのみ分かっている場合

尤度:

$$p(t|x, w, \beta) = \prod_{n=1}^N \frac{\text{平均} \quad \text{ノイズによる分散}}{N(t_n | w^T \phi(x_n), \beta^{-1})}$$

ガウス分布



最大尤度をとる $w_{ML} = \underset{w}{argmin} \sum_{n=1}^N (t_n - w^T \phi(x_n))^2$: 最小二乗誤差

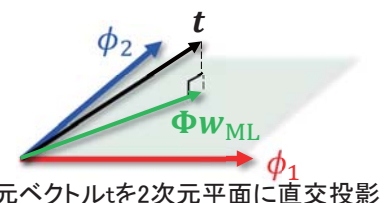
$$\nabla_w \ln(p(t|X, w, \beta)) = 2\beta \sum_{n=1}^N (t_n - w^T \phi(x_n)) \phi(x_n) = 0$$

$$N \times 2 \text{ の行列 } \Phi = \begin{pmatrix} \phi_1(x_1), \phi_2(x_1) \\ \vdots \\ \phi_1(x_N), \phi_2(x_N) \end{pmatrix} \text{ を用いると、}$$

$$\Phi^T t - \Phi^T \Phi w = 0$$

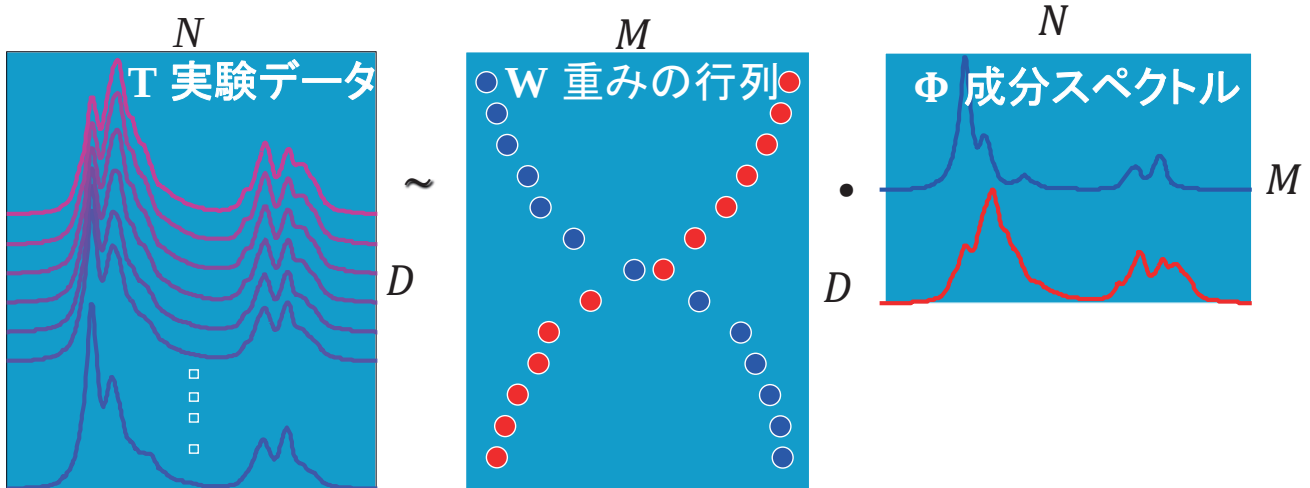
$$w_{ML} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T t = \Phi^+ t$$

pseudo inverse of Φ



最小二乗誤差②

成分スペクトルも不明の場合：多数データから抽出



TとWΦの間の二乗誤差 $E = \text{Tr}\{(\mathbf{T} - \mathbf{W}\Phi)^T(\mathbf{T} - \mathbf{W}\Phi)\}$

EのW、Φでの偏微分を0とすることで、

$$\mathbf{W} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T \mathbf{T} = \Phi^\dagger \mathbf{T}$$

$$\Phi = \mathbf{T} \mathbf{W}^T (\mathbf{W} \mathbf{W}^T)^{-1} = \mathbf{T} \mathbf{W}^{\dagger T}$$

Two-way 解析

成分スペクトルΦと重みWの両方を多数データの分解から得る

Alternating Least Squares (ALS)

$$\mathbf{W}_{\text{new}} = (\Phi_{\text{old}}^T \Phi_{\text{old}})^{-1} \Phi_{\text{old}}^T \mathbf{T}$$

$$\Phi_{\text{new}} = \mathbf{T} \mathbf{W}_{\text{old}}^T (\mathbf{W}_{\text{old}} \mathbf{W}_{\text{old}}^T)^{-1}$$

W, Φの成分を非負値にする

Modified Alternating Least Squares (MALS)

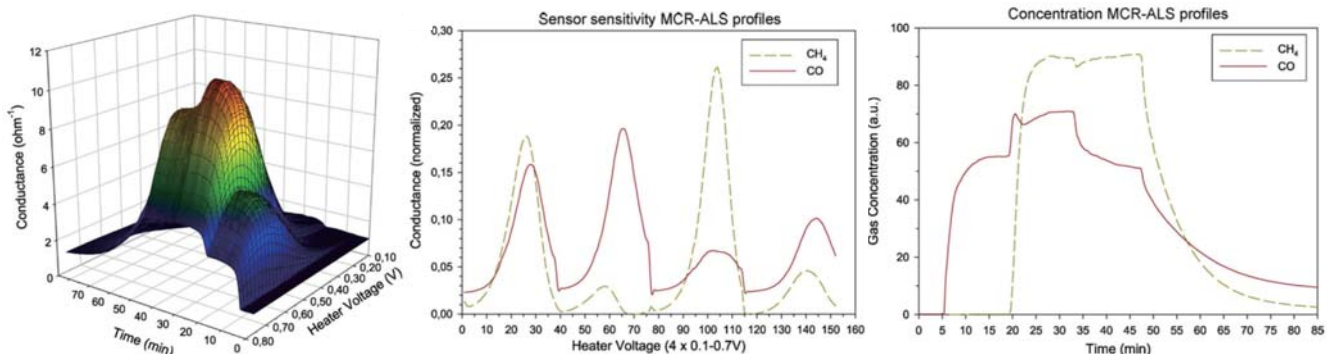
$$\mathbf{W}_{\text{new}} = (\Phi_{\text{old}}^T \Phi_{\text{old}} + \mathbf{M}_W)^{-1} (\Phi_{\text{old}}^T \mathbf{T} + \mathbf{M}_W \mathbf{W}_{\text{old}})$$

$$\Phi_{\text{new}} = (\mathbf{T} \mathbf{W}_{\text{old}}^T + \Phi_{\text{old}} \mathbf{M}_\Phi) (\mathbf{W}_{\text{old}} \mathbf{W}_{\text{old}}^T + \mathbf{M}_\Phi)^{-1}$$

W, Φの成分を非負値にする

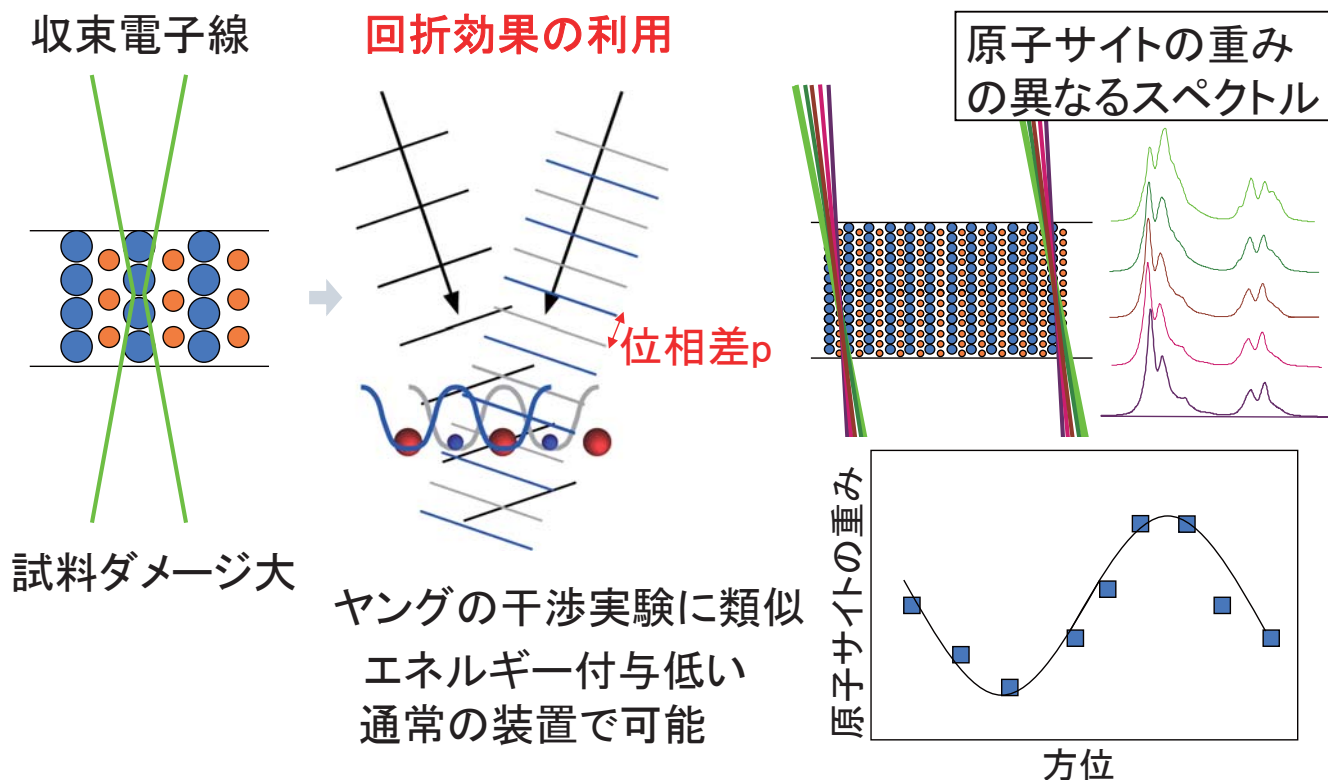
$\mathbf{M}_W, \mathbf{M}_\Phi$: 対角行列、過適合を防ぐ

適用例: ガスセンサ Montliuら(2010)

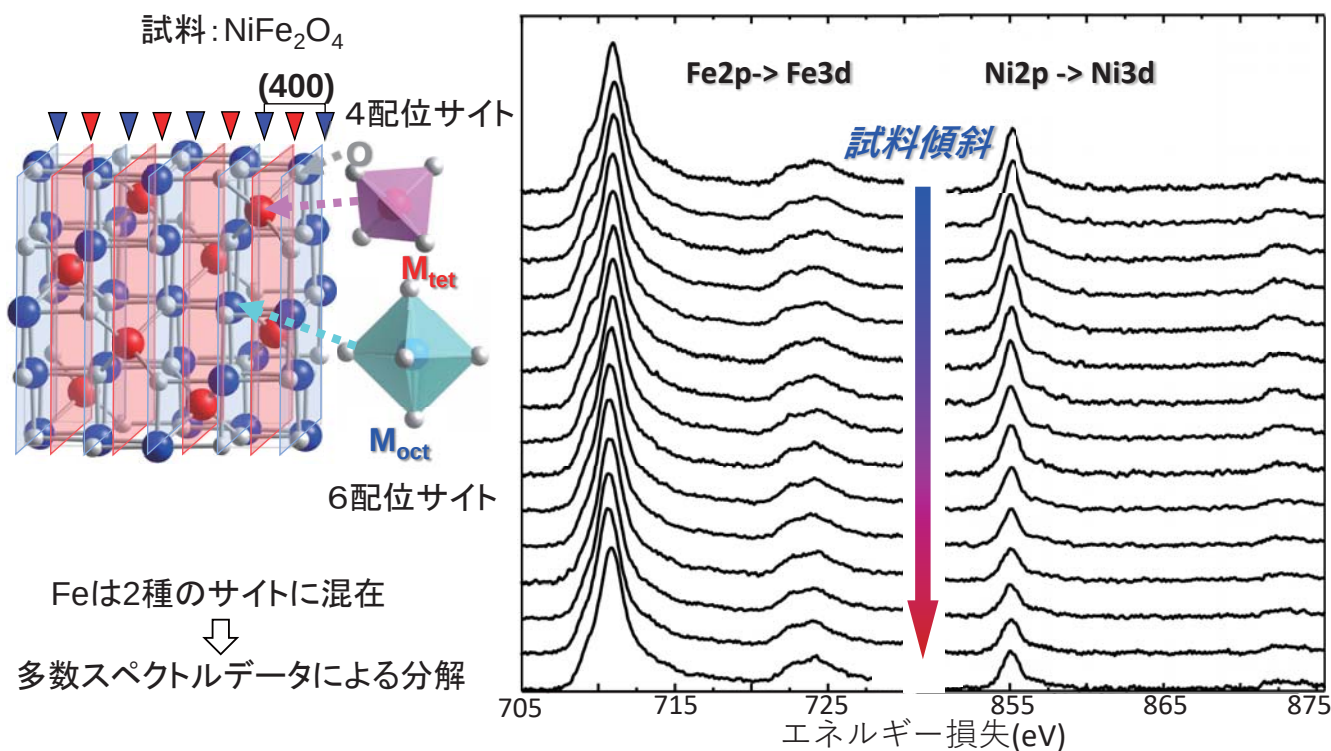


今回：電子チャネリング効果を用いた結晶サイト選択的な電子分光の例

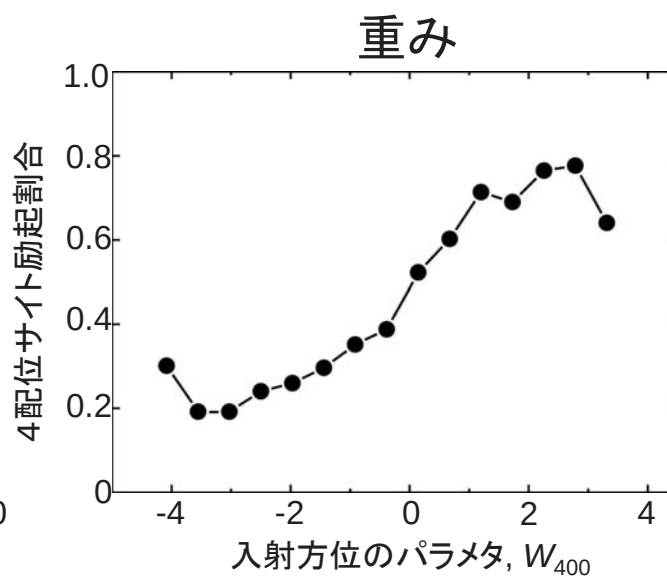
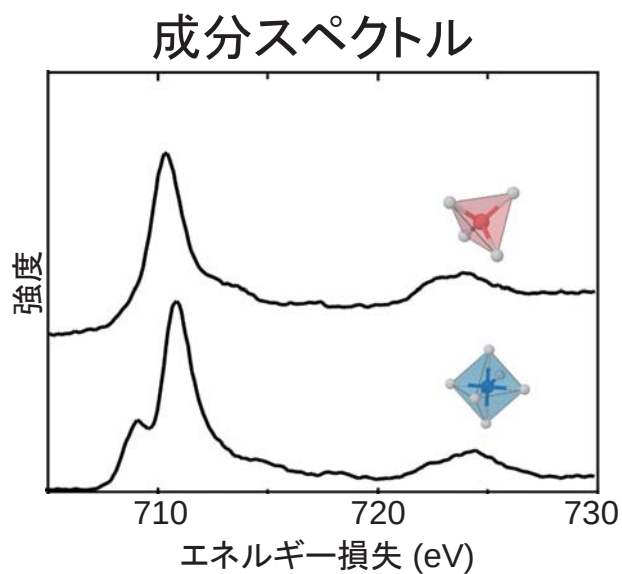
電子チャネリングによるサイト選択的電子分光



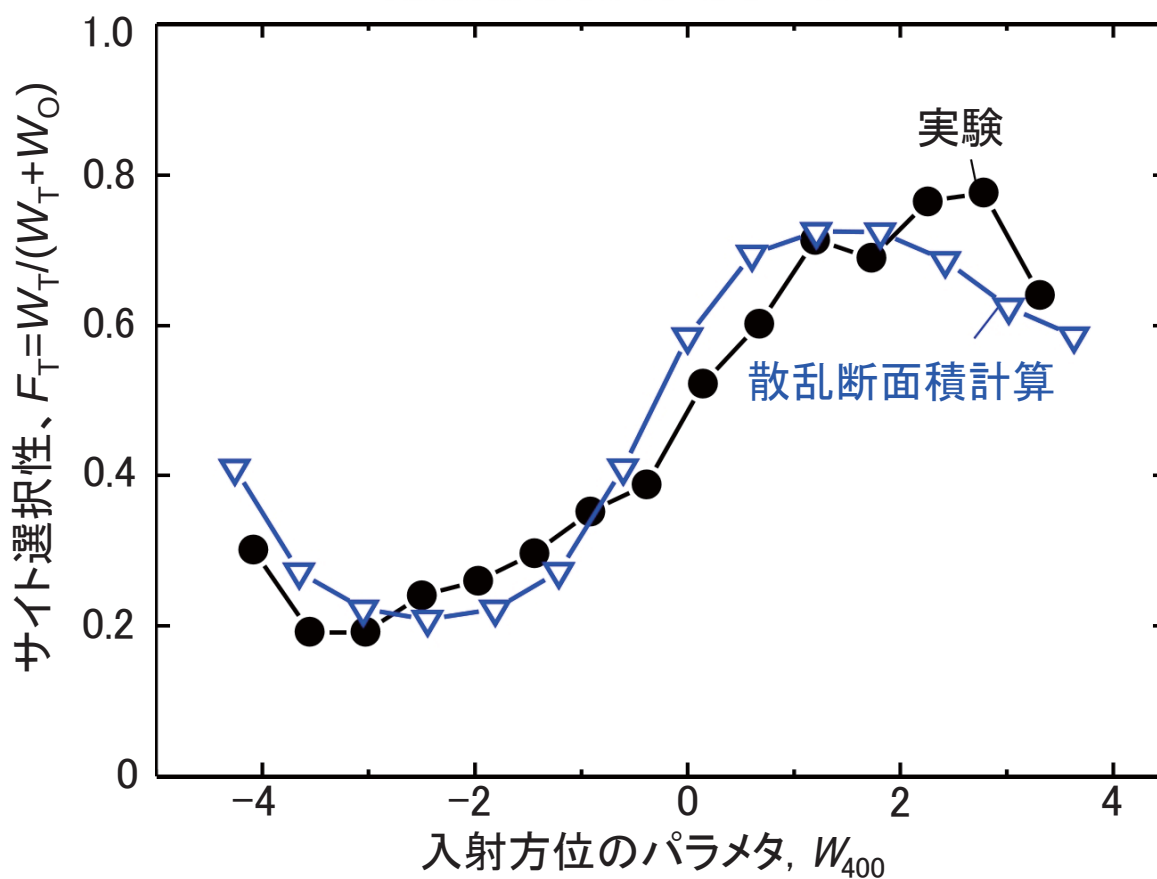
実験データ



分解結果

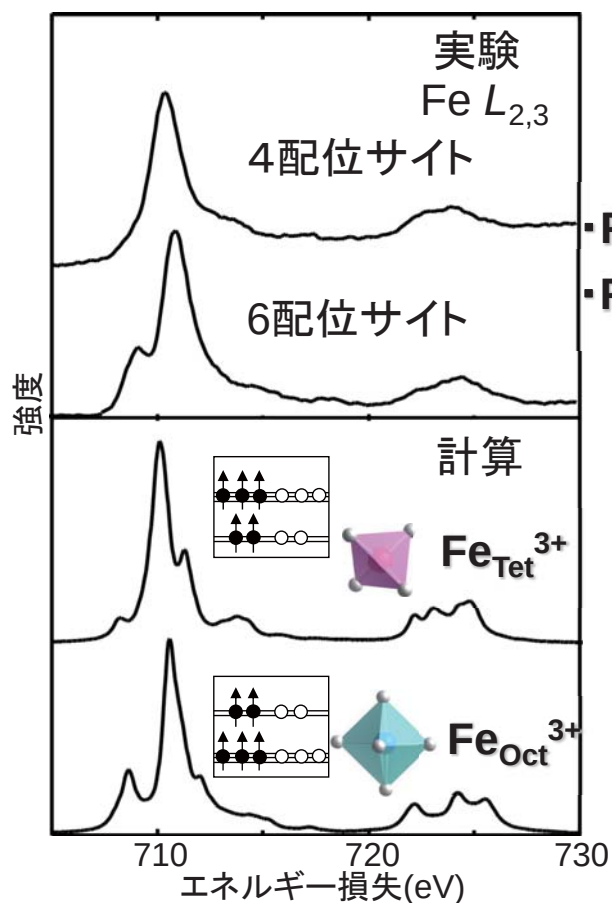


励起割合について



成分スペクトルについて

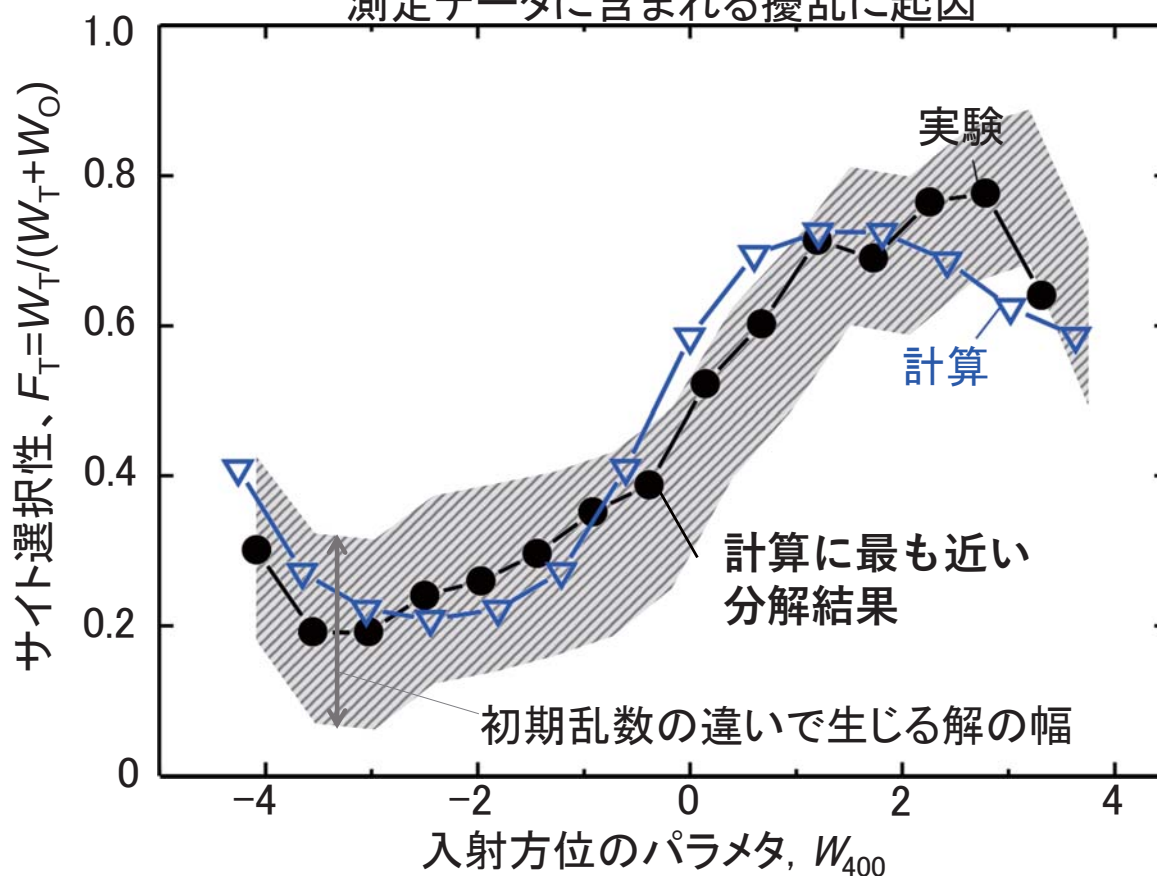
Tatsumiら(2010)



- Fe_{Oct} と Fe_{Tet} の価数: 3+
- Fe_{Oct} と Fe_{Tet} のスピン状態: ハイ-spin

解は幅をもつ

測定データに含まれる擾乱に起因



解の限定

1. 他の知見による検証(高精度計算、他実験、etc)
2. 二乗誤差＋正規化項(疎性、直交性、etc)

電子顕微鏡での電子分光 Shigaら(2016)

- ・空間分布行列 W の列ベクトルにソフトな直交制約
顕微鏡の分解能に応じた調節パラメタ s
- ・Automatic relevance determination (ARD) 事前確率の考えに基づく
疎性制約

$$\text{目的関数} = -\log(p(T|W, \Phi)p(W|\lambda)p(\Phi)p(\lambda|a, b))$$

$$+ s \sum_k \xi_k W_{\cdot k}^T w^{(k)},$$

$$\text{s. t. } \|W_{\cdot k}\|_2 = 1, w^{(k)} = \sum_{j \neq k} W_{\cdot j}$$

λ : ARD事前確率分布のスケーリングを担う対角行列

a, b : λ のハイパーパラメタ

ξ_k : k 番目の成分に対するラグランジュ未定乗数

まとめ: データ駆動サイエンスの第一歩

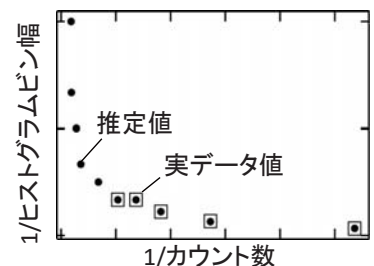
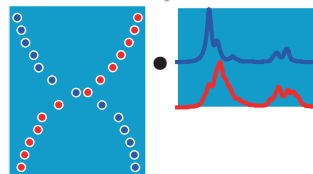
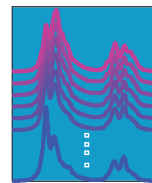
機械学習・統計に基づくデータ駆動的手法の活用により、散乱実験データの解析及び取得を高効率化し、未知の物質・材料情報を超解像で取得する。

・実験データの統計補強

ポアソン統計に基づく信号推定・計測効率化

多数データでの機械学習による信号推定

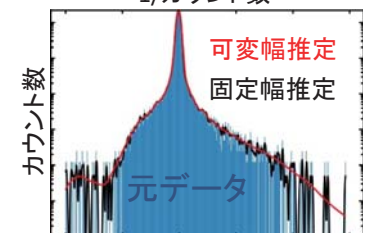
ベイズ推定による計測効率化



・計算での散乱イベントジェネレータ構築

分光器分解能関数の精密考慮

高精度散乱断面積計算



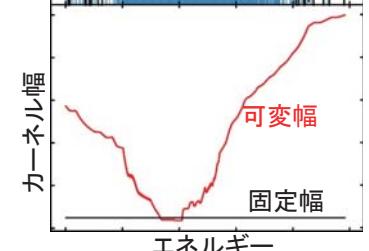
・多数計算データと少数大規模実験データの機械学習材料分析

水素の局所環境

磁性モデル

分散粒子形状・表面構造

Scientific Machine Learning benchmark suite



参考

・関連論文

- 1) Arai (2014) AAPS Bull., **24** (2014) 7.
- 2) Shimazaki (2007) Neural Computation, **19** (2007) 1503.
- 3) Muto (2019) J. Phys. Soc. Jpn., **88** (2019) 044002.
- 4) Shimazaki (2010) J. Comput. Neurosci. **29** (2010) 171.
- 5) Montoliu (2010) Sensors and Actuators B **145** (2010) 464.
- 6) Tatsumi (2010) Appl. Phys. Lett., **96** (2010) 201911.
- 7) Shiga (2016) Ultramicroscopy **170** (2016) 43.

・多変量解析

Eigenvector University (1週間程のハンズオン講習会@シアトル、有料)

・機械学習

Pattern Recognition and Machine Learning (e-book 無料) Bishop

参考



Eigenvector University 2022

MAY 15, 2022 - MAY 20, 2022

SEATTLE, WASHINGTON

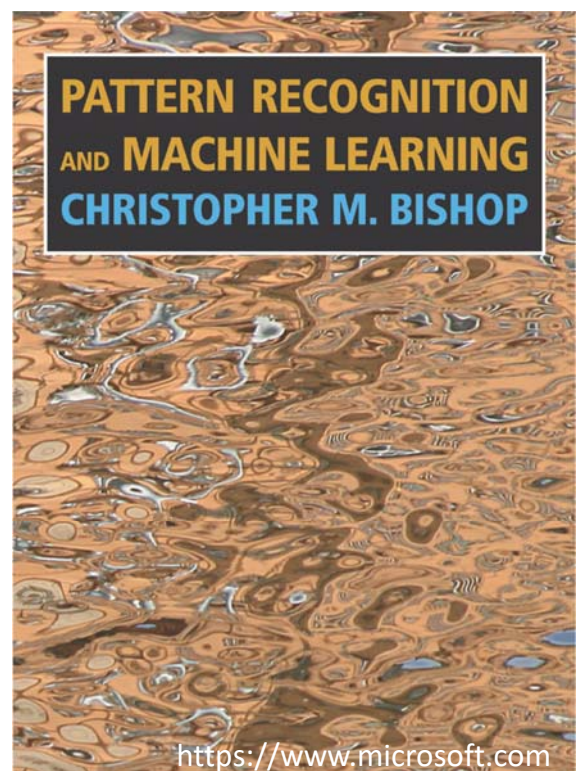
Rescheduled!

Eigenvector Research, Inc. is pleased to announce our 16th annual Eigenvector University. EigenU 2022 consists of 16 chemometrics short courses led by the [Eigenvector staff](#) including PLS Toolbox creator [Barry M. Wise](#) and Eigenvector co-founder [Neal D. Gallagher](#) plus our associate [Rasmus Bro](#). The courses will be held in Seattle, USA at the [Washington Athletic Club](#). EigenU will also include a Workshop Dinner, and a PowerUser Tips, Tricks & Poster Session.

- [About Seattle](#)
- [Target audience](#)
- [About the instructors](#)
- [Schedule](#)
- [PLS Toolbox/Solo PowerUser Tips & Tricks and Poster Session](#)
- [Workshop Dinner](#)
- [Course fees](#)
- [Registration, deadlines and cancellations](#)
- [Course venue and lodging](#)

<https://eigenvector.com>

線形回帰



PATTERN RECOGNITION
AND MACHINE LEARNING
CHRISTOPHER M. BISHOP

<https://www.microsoft.com>

機械学習やベイズの定理活用

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー2021今後の予定

2. 当社最新情報

3. 当社ソフトウェアのご案内

4. ご提供サービス

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

開催日程

No.	開催日	講師の先生方	テーマ
第2回	8月20日（金）	日本原子力研究開発機構 J-PARCセンター 物質・生命科学実験施設ディビジョン 共通技術開発セクション 研究主幹 巽 一蔵 様	データ処理とAI
第3回	9月3日（金）	慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 教授 高野 直樹 様	計算固体力学
第4回	9月16日（木）	京都大学大学院 医学研究科 人間健康科学系専攻 特定准教授 岩田 浩明 様	創薬ビッグデータ
第5回	10月6日（水） ※特別セミナー 13:00～17:00 （途中休憩含む） 定員300名	大阪大学 基礎工学研究科 機能創成専攻 教授 後藤 晋 様	流れの複雑現象
		九州大学 マス・フォア・インダストリ研究所 教授 河原 吉伸 様	
		東北大学 大学院工学研究科 航空宇宙工学専攻 教授 河合 宗司 様	
第6回	10月29日（金）	東京工業大学 科学技術創成研究院 フロンティア材料研究所 准教授 熊谷 悠 様	計算材料データベース

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー2021今後の予定

2. 当社最新情報

3. 当社ソフトウェアのご案内

4. ご提供サービス

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

2. 当社最新情報

(1) 当社パッケージソフトご案内セミナーのご案内

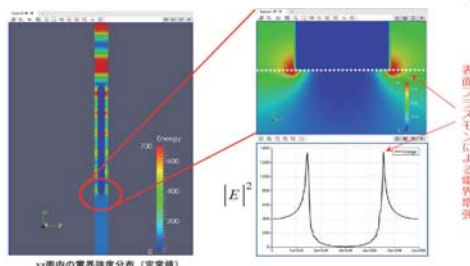
①【開催予定日】2021年8月25日(水)

【NEC(日本電気株式会社)様と共催】

電磁波解析ソフトウェア

「Advance/ParallelWave」ご紹介セミナー

Advance / ParallelWave は、電磁波の支配方程式である Maxwell 方程式をコンピューターシミュレーションによって解き、電磁波の挙動とそれを起源とする物理諸量を算出致します。

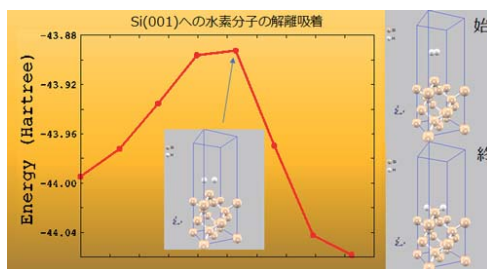


②【開催予定日】2021年10月

第一原理計算ソフトウェア

「Advance/PHASE」ご紹介セミナー

Advance/PHASE は、ナノテクノロジー研究開発を強力に支援する第一原理計算ソフトウェアです。



Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー2021今後の予定

2. 当社最新情報

3. 当社ソフトウェアのご案内

4. ご提供サービス

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフトのAIサービス

長年にわたるシミュレーション・ソフトウェアの開発・解析や、当社独自の深層学習ツールAdvance/iMacleの開発で培った実績・ノウハウを基に、機械学習や深層学習などのAI技術を用いた業務の効率化や、問題解決のお手伝いをいたします。

項目	内容
受託開発	お客様の課題に対して最適なモデルを検討・提案し、プログラム開発を実施します。
受託解析	お客様の課題に対して最適な解析方法を調査・提案し、解析を実施します。
環境構築	お客様の課題に対して最適な計算機環境を調査・提案し、環境構築を実施します。
ベンチマーク	機械学習・深層学習の関連ツールやライブラリ等のベンチマーク調査を行います。
論文調査	論文等を対象に、最新のモデルやトレンドを調査します。
コンサルティング	機械学習や深層学習など、AI技術に関する幅広いご相談を承ります。

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフト からの情報提供

1. アドバンスシミュレーションセミナー2021今後の予定

2. 当社最新情報

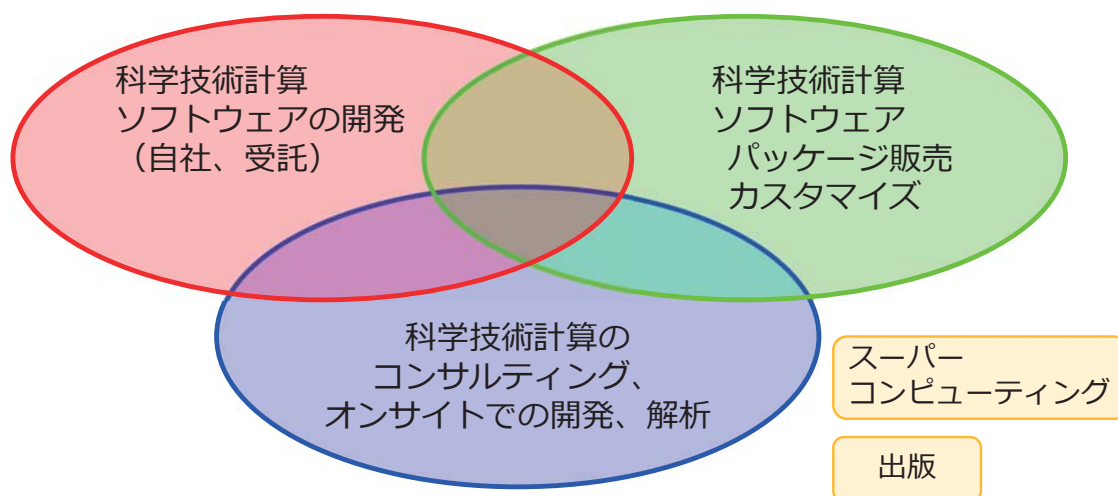
3. 当社ソフトウェアのご案内

4. **ご提供サービス**

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

事業内容

アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、
科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

Copyright ©2021 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

パッケージソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをリニューアルしました。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介します。

産業分野別	解析分野別
自動車・運輸	流体
材料・化学	爆発・燃焼
産業機械	構造
航空宇宙	振動音響
エレクトロニクス	ナノ・バイオ
建設土木	ブリボスト
原子力	半導体デバイス
エネルギー	光・電磁波
環境・防災	

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>



<http://www.youtube.com/user/advancesoft>





警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。
このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。
このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。