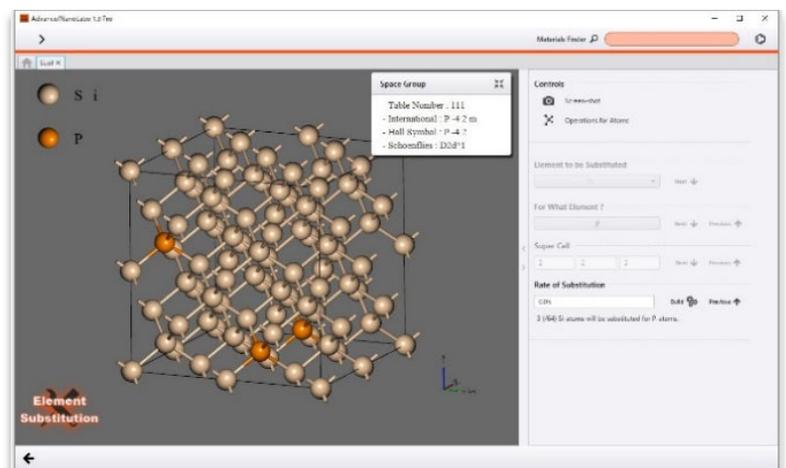


# オンラインセミナー NanoLabo新機能、 新製品 NeuralMD Pro ご紹介セミナー

2022年11月10日(木) 19:00-20:00

## 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
2.	Advance/NanoLabo Ver.2.6 のご紹介 .....	3
3.	Advance/NeuralMD Pro のご紹介 .....	15
4.	今後の開発ロードマップ .....	33
5.	価格及び関連サービスのご紹介 .....	35





# NanoLabo新機能、 新製品NeuralMD Pro ご紹介セミナー

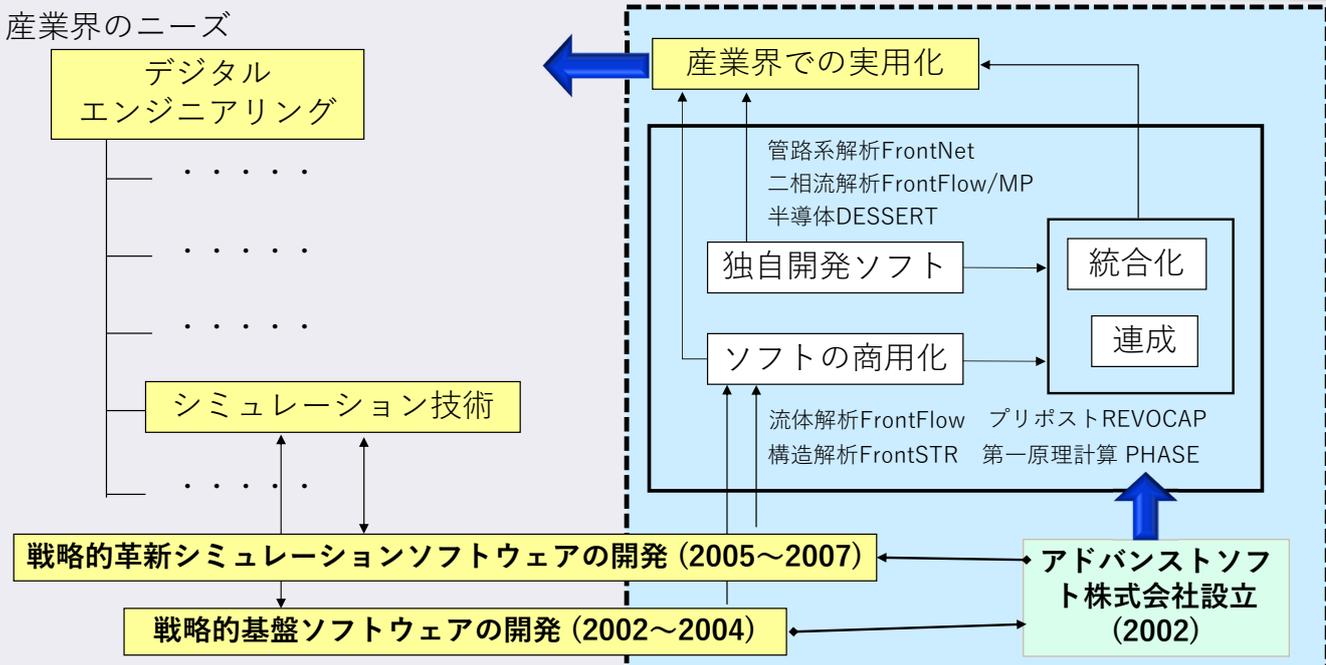


アドバンスソフト株式会社  
2022/11/10 (木) 14:00~16:00  
(開場 13:45)

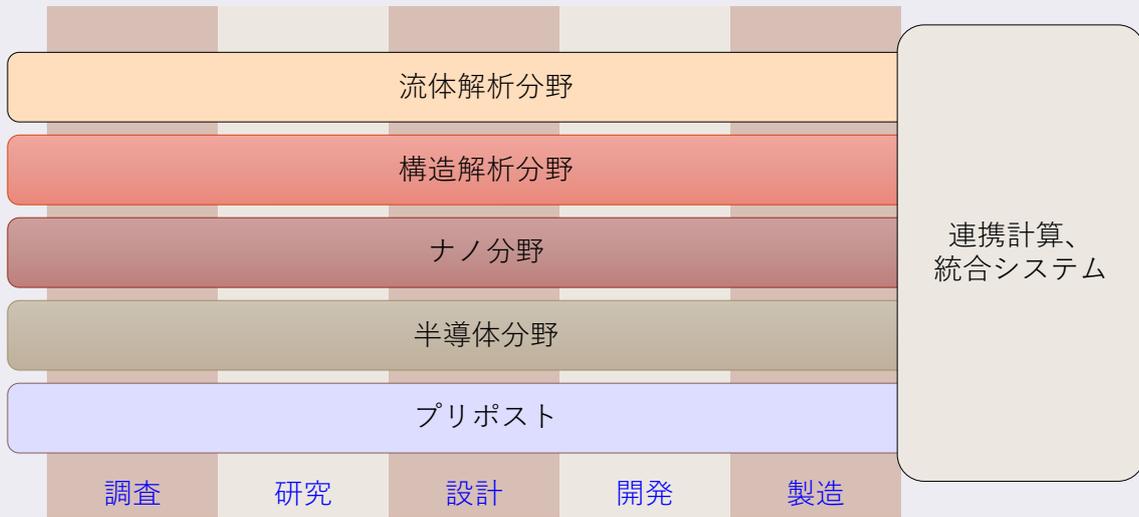
Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

## 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

<p>第一原理計算ソフトウェア <b>Advance/PHASE</b></p> <p>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。</p> <p><b>ナノ材料</b> GUI 付属</p>	<p>ナノ材料解析統合 GUI <b>Advance/NanoLabo</b></p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した総合 GUI です。</p> <p><b>ナノ材料</b> プリポスト</p>	<p>流体解析ソフトウェア <b>Advance/FrontFlow/red</b></p> <p>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。</p> <p><b>流体</b></p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー <b>Advance/FOCUS-i</b></p> <p>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。</p> <p><b>流体</b></p>
<p>大規模 3 次元 TCAD システム <b>Advance/TCAD</b></p> <p>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。</p> <p><b>半導体デバイス</b> GUI 付属</p>	<p>ニューラルネットワーク分子動力学システム <b>Advance/NeuralMD</b></p> <p>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。</p> <p><b>ナノ材料</b> AI・機械学習</p>	<p>気液二相流解析ソフトウェア <b>Advance/FrontFlow/MP</b></p> <p>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。</p> <p><b>流体</b></p>	<p>管路系流体透過解析ソフトウェア <b>Advance/FrontNet</b></p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1 次元透過解析の実用的なソフトウェアです。</p> <p><b>流体</b> GUI 付属</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア <b>Advance/Front/ParallelWave</b></p> <p>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。</p> <p><b>光波・電磁波</b></p>	<p>構造解析ソフトウェア <b>Advance/FrontSTR</b></p> <p>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。</p> <p><b>構造</b></p>	<p>大気拡散影響予測システム <b>Advance/Emerg</b></p> <p>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。</p> <p><b>流体</b> GUI 付属</p>	<p>深層学習ツール <b>Advance/iMacle</b></p> <p>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、最小限度の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。</p> <p><b>AI・機械学習</b></p>
<p>汎用プリポストプロセッサ <b>Advance/REVOCAP</b></p> <p>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。</p> <p><b>プリポスト</b></p>	<p>音響解析ソフトウェア <b>Advance/FrontNoise</b></p> <p>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。</p> <p><b>音響</b></p>	<p>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）</p> <p><b>Advance Soft</b></p>	

# Advance/NanoLabo



## Ver.2.6 のご紹介

アドバンスソフト株式会社  
NanoLabo新機能、新製品NeuralMD Proご紹介セミナー  
[ 14:05~14:45 ]

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

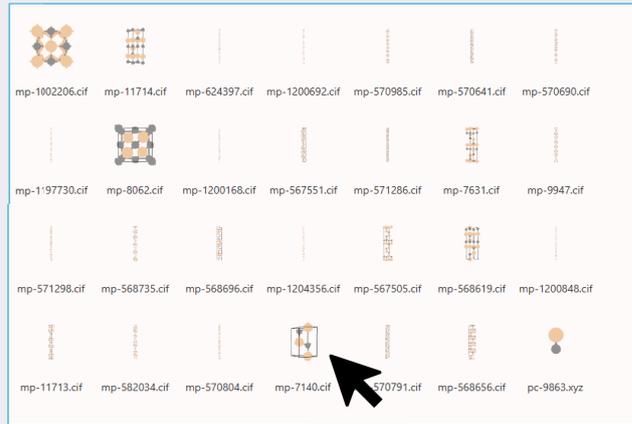
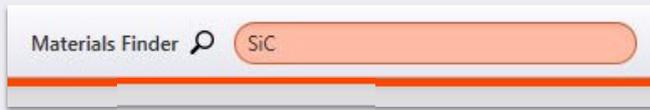
## Advance/NanoLabo

- ✓ 第一原理計算と分子動力学のシミュレーションを行うための、  
モデリング、計算実行、計算結果の可視化を統合したGUIシステム。
- ✓ 2022年02月、Ver.2.4をリリース。  
2022年05月、Ver.2.5をリリース。  
2022年09月、Ver.2.6をリリース。 (新機能の詳細は後程)
- ✓ ユーザーの行うべき作業を極限まで最小化。  
⇒ 化学式を入力するだけでバンド計算が出来ます。

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

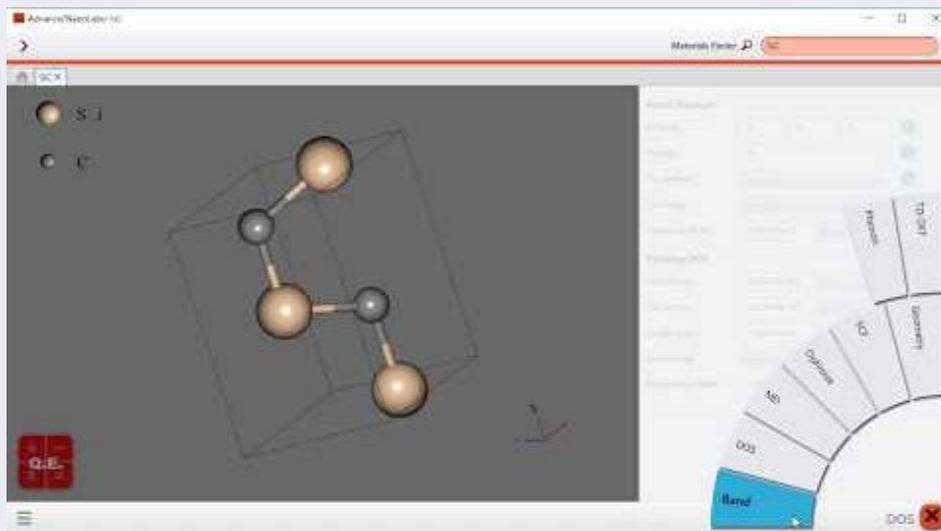
# 化学式 ⇒ バンド構造



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

# 化学式 ⇒ バンド構造



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

# 主な機能

1. モデリング
2. 計算実行
3. 計算結果の可視化

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

## 1. モデリング

- 材料データベース検索
  - Materials Project (無機結晶) <<https://materialsproject.org>>
  - PubChem (分子系) <<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>>
- モデルの加工
  - セル平行移動
  - スーパーセル
  - 不純物置換モデル
  - 格子欠陥モデル
  - 表面/界面モデル
  - 有機分子の描画
  - 表面への小分子吸着モデル
  - 溶媒分子充填
  - Primitive Cell ⇔ Standard Cell
  - 空間群の判定
  - 高分子モデリング など

6

## 2. 計算実行

- 計算エンジン
  - Advance/PHASE (当社製品)
  - Quantum ESPRESSO (オープンソース、第一原理計算) <<https://www.quantum-espresso.org>>
  - LAMMPS (オープンソース、分子動力学) <<https://lammps.sandia.gov>>
- 計算機能  
SCF計算、構造最適化、バンド構造、状態密度、TD-DFT、Phonon、NEB法、仕事関数、XAFS、NMR、第一原理MD、Car-Parrinello MD、古典MD、拡散係数、熱伝導率、など
- 計算制御
  - ジョブスケジューラ (PBS、SLURMに対応)
  - Pythonスクリプト (APIを公開: <https://nanolabo-doc.readthedocs.io/ja/latest/python.html>)
- リソース
  - ローカルマシンでのジョブ実行 (Windows10, CentOS7, AlmaLinux8, macOS)
  - 計算サーバーへのジョブ投入 (SSH接続)
  - クラウドシステム (Exabyte.io社など)

7

## 3. 計算結果の可視化

- ログファイル表示
- 収束状況チェック
- 構造の動画表示 (構造最適化、分子動力学、Metropolis法)
- バンド構造
- 状態密度
- 各種スペクトル表示 など

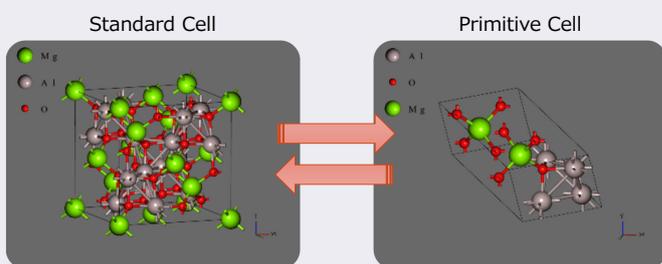
# モデリング機能の詳細

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

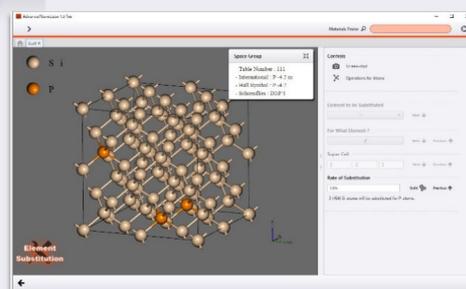
9

## 1. 結晶系

### セル変換



### 不純物置換

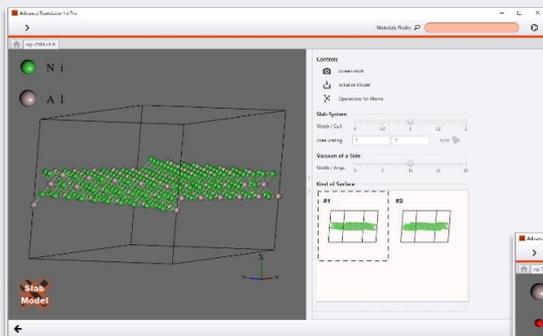


Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

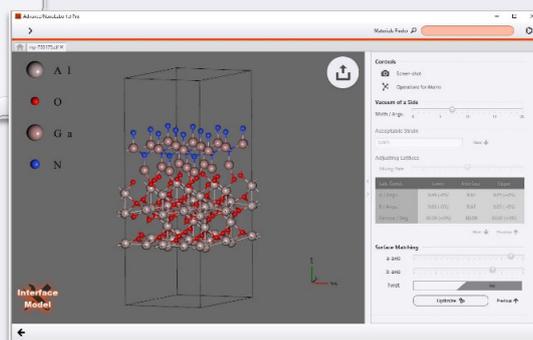
10

## 2. 表面・界面系

### 表面モデル



### 界面モデル

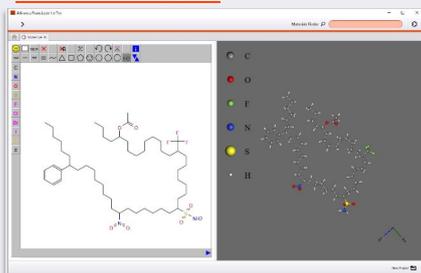


Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

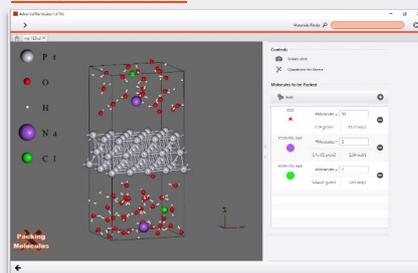
11

## 3. 分子系

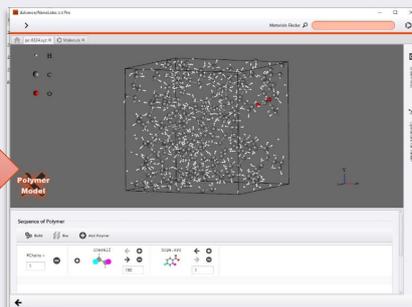
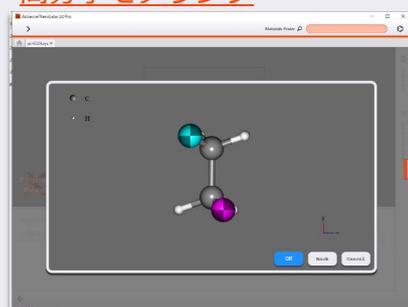
### 有機分子の描画



### 溶媒分子充填



### 高分子モデリング



12

# 計算機能の詳細

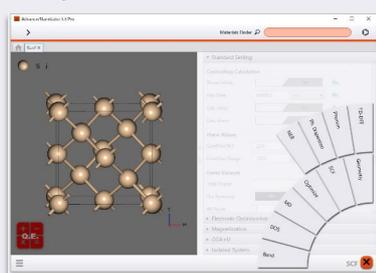
Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

13

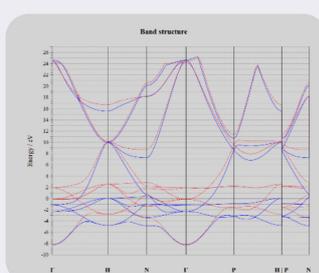
## 1. Quantum ESPRESSO

- ✓ 結晶構造から直ちに、適切な入力ファイルを自動生成。
- ✓ ユーザー自身が面倒な計算条件の設定を行う事なく、各種計算を実行可能。
- ✓ 計算の進捗状況および結果を可視化。(種々のポスト処理が利用可能)

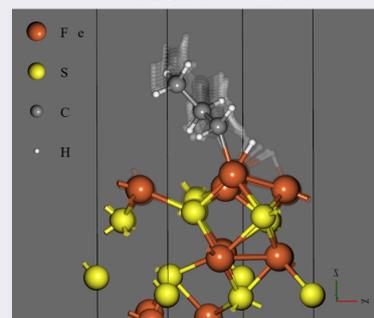
Quantum ESPRESSO入力画面



バンド構造図のプロット



NEB反応経路の残像表示



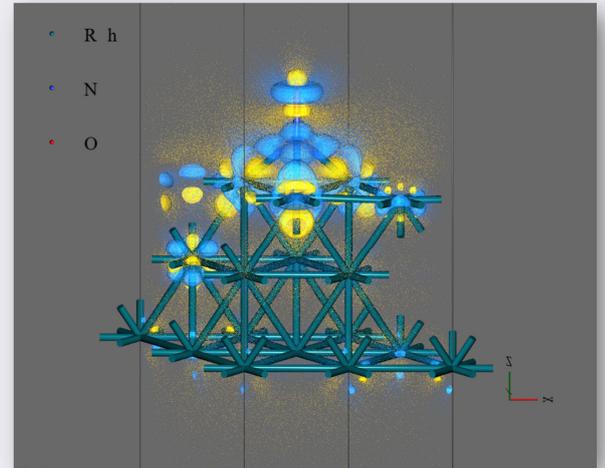
※静岡大学 波部先生よりご提供頂いたデータ。  
FeS表面でのプロパン分子の脱水素反応。

14

# 1. Quantum ESPRESSO

## 利用可能な計算手法一覧

SCF計算	構造最適化
Hybrid汎関数	vdW補正 (vdW-DF、rVV10、DFT-D)
バンド構造	状態密度 (PDOS電卓)
電荷密度などの可視化	第一原理MD
Car-Parrinello MD	TD-DFT
XAFS/EELS	Phonon (バンド構造、状態密度、IR)
化学反応パス (NEB法)	仕事関数 (ESM法)
GIPAW法 (NMR、EPR、超微細)	など



差分電荷密度の可視化 (Rh111面へのNO分子吸着)

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

15

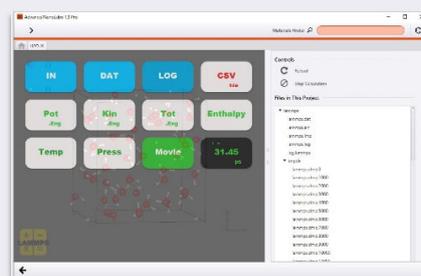
# 2. LAMMPS

- ✓ Lennard-Jones、Charge、OPLS-AA、ReaxFF、EAM、MEAM、Tersoff、**Neural Network力場**に対応。
- ✓ 有機分子に対して、OPLS-AAの力場パラメータを自動的にアサイン。
- ✓ 多段階での計算スキームが設定可能。(e.g. NVTアンサンブルで100ps運動させたのち、NPTアンサンブルに切り替え)
- ✓ 計算実行の最中であっても、動力学の様子をアニメーション表示可能。
- ✓ 拡散係数、熱伝導率、粘性係数、動径分布関数の解析も可能。

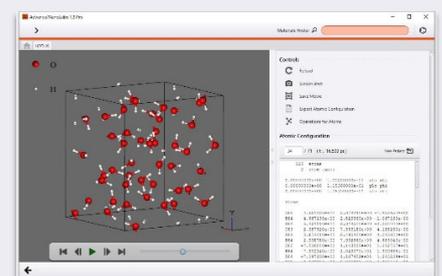
多段階計算スキーム設定画面



計算項目の一覧表示



アニメーション表示



16

## Ver.2.4 ~ 2.6 の新機能

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

17

## Ver.2.4 および Ver.2.5 の新機能

バージョン	リリース時期	実装された新機能
2.4	2022年2月	<ul style="list-style-type: none"><li>• Open Catalyst 2020の汎用グラフニューラルネットワークカ場に対応</li><li>• Java VMの引数、メモリー使用量の設定</li><li>• NeuralMDのライセンスエラー時に待機設定</li><li>• NeuralMDのin-situテストに対応</li><li>• QE/LAMMPSの実行体をOpenMPI/oneAPIでコンパイルしたものに変更</li></ul>
2.5	2022年5月	<ul style="list-style-type: none"><li>• LAMMPSでのNPTアンサンブル時のセル形状設定</li><li>• NeuralMDの自己学習ハイブリッドモンテカルロ法に対応</li><li>• SSH接続時のプロキシ設定</li></ul>

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

18



# Ver.2.6 の新機能

LAMMPSインターフェースを中心に大幅な機能追加

バージョン	リリース時期	実装された新機能
2.6	2022年9月	<p>【LAMMPS】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>初速度を指定の温度で生成する機能</li> <li>計算実行前に、入力ファイルを表示および編集する機能</li> <li>NPHアンサンブルに対応</li> <li>多体力場(Tersoff、EAM、ReaxFF、NeuralMD)使用時、入力ファイル中の原子の順序を自動修正</li> <li>構造最適化時のセル変形の設定</li> <li>入力ファイルに任意のコマンドを追加する機能</li> <li>ユーザー定義を含む任意の変数をCSV出力&amp;時系列プロットする機能</li> <li>画面上で原子グループを定義する機能</li> <li>原子グループに電場を印加/外力を加える/指定速度で移動させる/指定速度でセル変形させる機能</li> </ul> <p>【Quantum ESPRESSO】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Phonon計算にて、有効電荷を使用した格子誘電関数の計算機能</li> <li>Phonon分散にて、Non-Analytic Termの計算に対応</li> <li>Car-Parrinello MDにおけるAutopilotの設定画面を追加</li> <li>NanoLabo Tool に新しい擬ポテンシャルライブラリーを追加 (GBRV、SSSP)</li> <li>SCF計算における初期電荷量を設定する機能</li> </ul> <p>【その他】</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>分子描画機能において、3次元構造の生成にRDkitを使用 (UFFによる構造最適化)</li> <li>より対称性の高い結晶構造を探索する機能 (判定閾値を指定した対称性判定)</li> <li>リモートサーバーへの接続をテストする機能</li> <li>SSH接続の公開鍵認証で、OpenSSH形式の秘密鍵に対応</li> <li>NanoLabo Tool PATH設定用パッチファイルを同梱 (Window版のみ)</li> <li>外部ファイラーでフォルダーを開く機能</li> </ul>

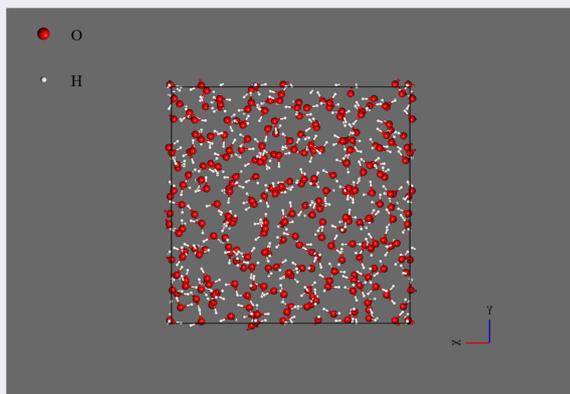
21

# LAMMPS解析事例①

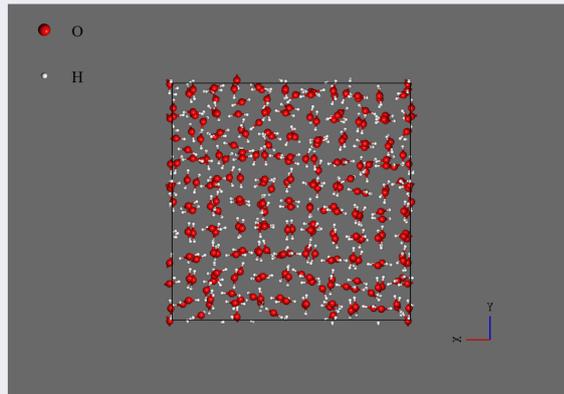
## 外部電場印加による過冷却水の結晶化

- 256個の水分子を含むユニットセルにて、TIP3P力場でMD計算を実行
- NVTアンサンブルにて、298Kにて平衡させた後に250Kまで冷却して過冷却状態を再現
- その後、Z軸方向に0.5V/Åの外部電場を印加して平衡に達するまでシミュレーションを実施

外部電場無しでの構造



外部電場有りでの構造



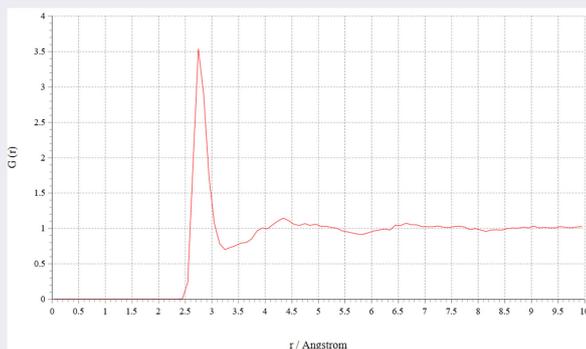
22

# LAMMPS解析事例①

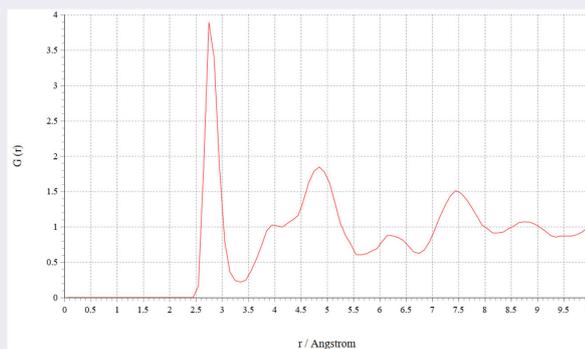
## 外部電場印加による過冷却水の結晶化

- 外部電場の印加により、水分子が整列して結晶化していることが確認できる。

外部電場無しでの動径分布



外部電場有りでの動径分布



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

23

# LAMMPS解析事例②

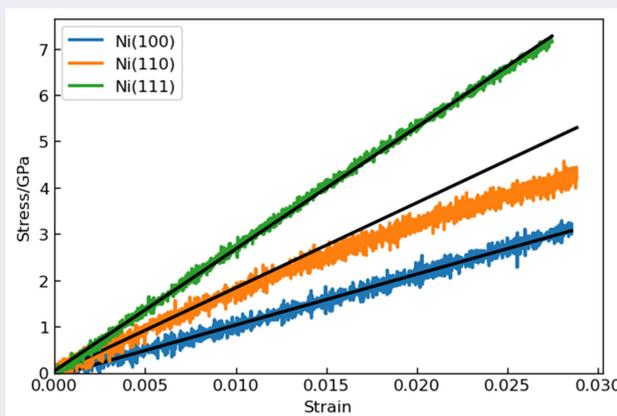
## セル変形によるNi結晶のヤング率計算

- FCC構造のNi結晶のスーパーセルモデルを作成して、MD計算を実行
- (100)、(110)、(111)方向がZ軸となるように4000原子程度のスーパーセルモデルを作成
- EAM力場を使用して、XY方向についてのみ圧力制御したNPTアンサンブルを適用
- Z軸方向に0.001 Å/psの速度でセルを変形させつつ、1nsのシミュレーションを実施

Stress-Strain曲線の傾きからヤング率を評価

面方位	計算値	実験値 <sup>†</sup>
(100)	110.0 GPa	121.3 GPa
(110)	184.0 GPa	203.8 GPa
(111)	263.5 GPa	262.2 GPa

<sup>†</sup>ニッケル単結晶のヤング率の結晶異方性と温度変化. 日本金属学会誌, 1968, 32.6: 525-528.



24

【新製品】



# Advance/NeuralMD Pro

## のご紹介

アドバンスソフト株式会社  
NanoLabo新機能、新製品NeuralMD Proご紹介セミナー  
[ 14:45~15:35 ]

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

Advance/NeuralMD Pro  
= Advance/NeuralMDのGPU版

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

# アウトライン

1. Advance/NeuralMDについて
2. GPUに対応した“Pro”について
3. GPU環境でのベンチマーク
4. 力場データベースのご紹介

## 1. Advance/NeuralMDについて

# Advance/NeuralMD

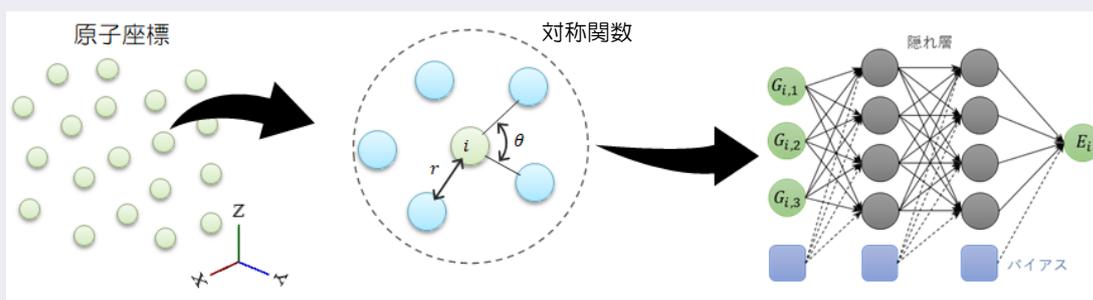
- Advance/NeuralMDは、Neural Network力場を作成して運用するためのソフトウェア。現バージョンは、Ver.1.7。
- Advance/NeuralMD自体はコマンドラインから操作する実行体のみで構成されているが、Advance/NanoLabo(GUI)からの操作も可能。
- 計算エンジンを自社開発しており、種々の特徴的な機能を搭載。
  1.  $\Delta$ -NNP法による効率的な学習
  2. Metropolis法による未知教師データの生成
  3. 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

# Neural Network力場について

- 分子動力学計算にて使用する分子力場をNeural Networkで表現したもの。
- 第一原理計算(DFT)の結果を教師データとしてNeural Networkを学習させる。
- 既存の分子力場(OPLS-AA、ReaxFF、 Tersoffなど)に比べて高精度(ただし計算コストも高い)。
- 原子座標から各原子の化学環境を表現した対称関数を生成して多層パーセプトロンに入力、エネルギーを出力する。逆方向の伝搬で力(エネルギーの微分)も計算できる。



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6

# Neural Network力場について

## 長所

- 第一原理の精度を再現しつつ、数千原子系での数ns以上の分子動力学計算が可能。
- 既存の分子力場が存在しない系に対しても、ユーザーが自ら力場を作成できる。

## 短所

- 既存の分子力場よりも計算コストが高く (ReaxFFの5倍~)、一般的な計算サーバーでは数千原子系の計算が限界。  
⇒ GPU化により大幅に高速化され、数万~数十万原子系での計算も可能に！
- 力場の性能や精度が、教師データの品質・作成手順・ユーザーの練度などに依存する。  
⇒ 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法により前バージョンにて解決済み！

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

7

## 【特徴機能①】

# Δ-NNP法

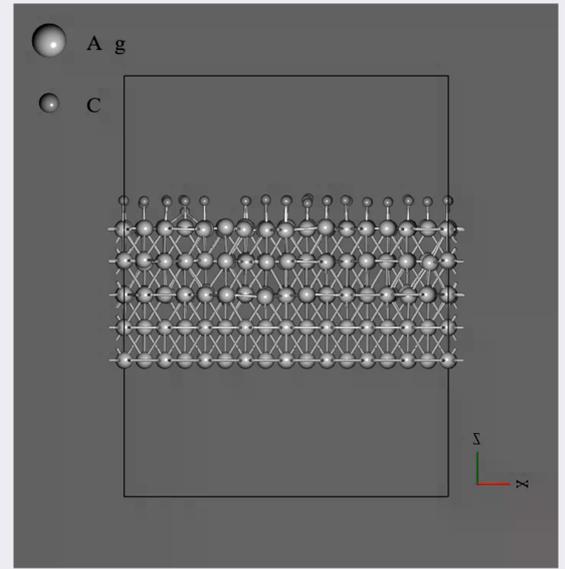
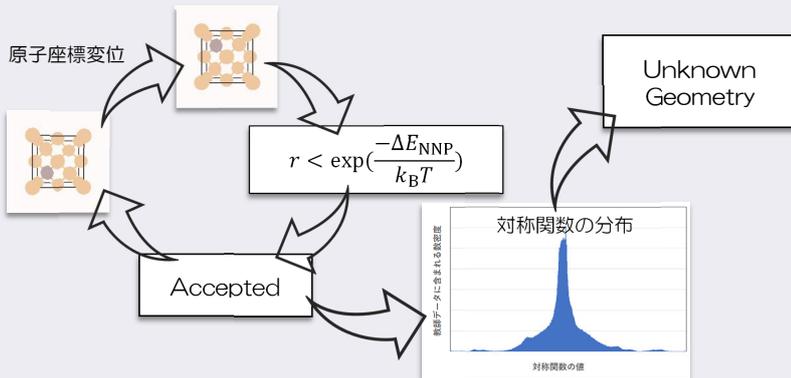
- 通常のNeural Network力場(NNP)法では、系の全エネルギー $E_{\text{tot}}$ をNNPにて計算されたエネルギー $E_{\text{NNP}}$ にて表現する： $E_{\text{tot}} = E_{\text{NNP}}$
- 当社ではNNP法を改良した差分NNP法(Δ-NNP法)を独自に開発し、自社製品であるNeuralMDに実装した。Δ-NNP法では、全エネルギー $E_{\text{tot}}$ を古典力場にて計算されたエネルギー $E_{\text{C}}$ とNNPにて計算されたエネルギー $E_{\text{NNP}}$ の和で表現する： $E_{\text{tot}} = E_{\text{C}} + E_{\text{NNP}}$
- 古典力場としては、Lennard-Jones様の2体ポテンシャルを使用する：
$$E_{\text{C}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{A}{r_{ij}^{12}} + \frac{B}{r_{ij}^{10}} + \frac{C}{r_{ij}^8} + \frac{D}{r_{ij}^6}$$
- Neural Networkの教師データにはDFTで計算されたエネルギー $E_{\text{DFT}}$ そのものではなく、DFTと古典力場の差分 $E_{\text{DFT}} - E_{\text{C}}$ を使用する。
- 無機結晶においては、Lennard-JonesやBuckinghamなどの2体関数にてポテンシャル地形の概ねの構造を表現できることが知られている。当社はこれに着目してポテンシャル地形の第0近似として2体関数を適用し、2体関数で表現しきれない余剰の部分をNNP法で補完するというアプローチを採用した。その結果、NNPは凹凸の少ない地形のみを表現することになり、Neural Networkの真価を十分に発揮することなく結晶系を取り扱ることが出来る。つまり、結晶系という平時においては、Neural Networkは余力を十分に残した状態にある。逆に、欠陥や不純物、表面や界面、イオンが激しく運動するといった特殊な状況においては、このNeural Networkの余力が機能する。
- また、Δ-NNP法の適用により、(1)Neural Network学習過程の収束性が向上し、且つ、(2)少ない教師データでも有用な力場を作成できるという大きなメリットを得ることに成功した。

8

【特徴機能②】

# Metropolis法による未知教師データの生成

- 作成済みのNeural Network力場を利用して、Metropolis法によるモンテカルロ・シミュレーションが実施可能。
  - 原子の並進移動、原子種の入れ替え、空孔位置の入れ替えの操作が利用可能。
- シミュレーションの過程で生成された多数の構造を教師データに追加して、Neural Networkの再学習に使用できる。
  - 対称関数の分布(ヒストグラム)を利用して、未知の構造のみを再学習用に抽出する。



※京都大学、黒川先生よりご提供頂いたデータ。  
Ag表面でのC原子の拡散・成長過程。

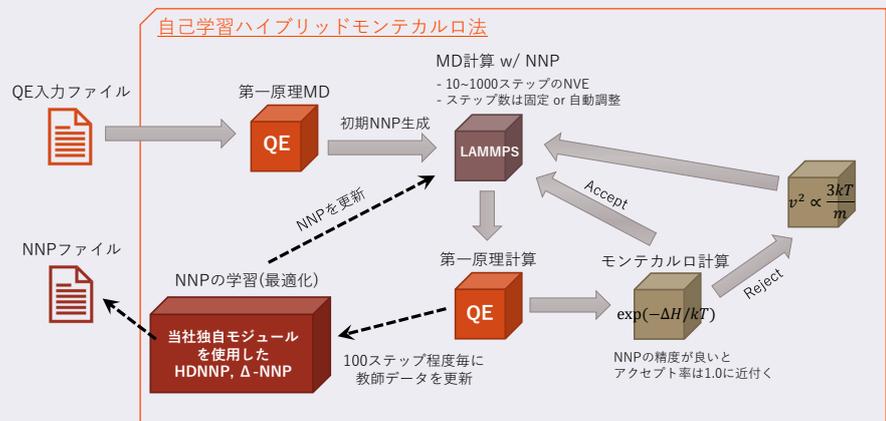
【特徴機能③】

# 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法

“Self-learning hybrid Monte Carlo: A first-principles approach”, Y.Nagai, et al., Phys. Rev. B 102 (2020) 041124

## Advance/NeuralMDにおける実装

- 第一原理計算には、Quantum ESPRESSO (オープンソース)を使用
- 分子動力学計算には、LAMMPS (オープンソース)を使用
- Neural Networkの学習については、当社独自実装のモジュールを使用
- モンテカルロ法におけるアンサンブルには、NVTおよびNPTに対応
- アクセプト率に応じて、MD計算のステップ数を自動調整する機能を搭載
- 全ての機能をAdvance/NanoLabo(GUI)から操作可能



自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の計算スキーム。  
ユーザーは、QEの入力ファイルを用意するのみでよい。

## 2. GPUに対応した“Pro”について

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

11

## Advance/NeuralMD “Pro”

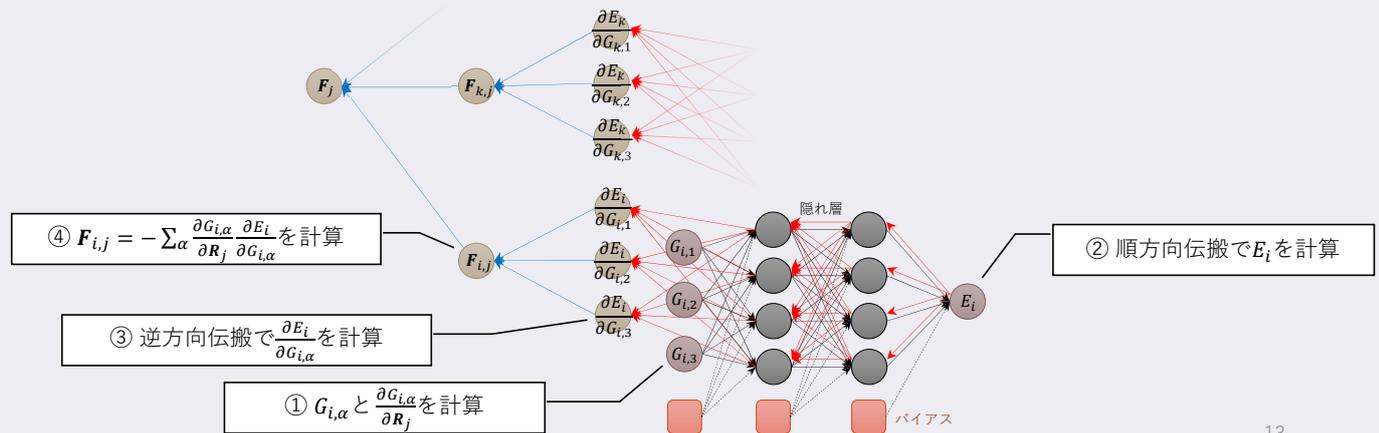
- 2022年9月に、Advance/NeuralMDをGPU化したAdvance/NeuralMD Proをリリース
- Neural Networkの学習過程およびLAMMPSでの分子動力学計算をGPU化
- MPIと併用することで複数のGPUを搭載したマシン and/or GPUを搭載した複数のマシンノードに対応
- GPU 1 デバイス当たり 2～4 つのMPIプロセスを起動することで、GPUとCPUの双方の稼働率を常に高い状態に保持できるように設計
- NVIDIA A100 x 8 を使用して、Intel Xeon Platinum の約60倍の高速化を実現
- 原子数の制限が無いので、複数GPUを使って数万～数十万原子系の計算が可能

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

12

# Neural Network力場の計算手続き

Neural Network力場の計算では、下図のような多層パーセプトロンを用いた手続きにてエネルギーおよび力を計算する。まずは、①対称関数 $G_{i,\alpha}$ および隣接原子座標 $\mathbf{R}_j$ による微分 $\frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial \mathbf{R}_j}$ を計算します。これを②順方向に伝搬させてエネルギー $E_i$ を計算した後、③逆方向への伝搬にて微分 $\frac{\partial E_i}{\partial G_{i,\alpha}}$ を計算します。最後に、④隣接原子間で $\sum_{\alpha} \frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial \mathbf{R}_j} \frac{\partial E_i}{\partial G_{i,\alpha}}$ を計算して原子 $i$ が $j$ に及ぼす力 $\mathbf{F}_{i,j} = -\frac{\partial E_i}{\partial \mathbf{R}_j}$ を計算します。



13

# Neural Network力場の計算手続き

さらに、Neural Networkの学習過程においては、⑤力 $\mathbf{F}_i$ の誤差を計算する必要がある。力はNeural Networkの一階微分として計算されるため、その誤差を計算するには二階微分が要求される。この二階微分の計算には多数回のLevel-2およびLevel-3 BLASが実行されるため、④以上の計算コストが掛かり、学習過程における計算時間の90%以上を占める。

	計算プロセス	計算方法	計算コスト	学習過程	LAMMPSでのMD
①	対称関数とその微分	明示的にコーディング	最大	最初に1度だけ計算	MDステップ毎に計算
②	順方向伝搬	Level-3 BLAS	小	エポック毎に計算	MDステップ毎に計算
③	逆方向伝搬	Level-3 BLAS	小	エポック毎に計算	MDステップ毎に計算
④	隣接原子間での力の縮約	Level-2 BLAS	中	エポック毎に計算	MDステップ毎に計算
⑤	二階微分	Level-2,3 BLAS	大	エポック毎に計算	計算しない

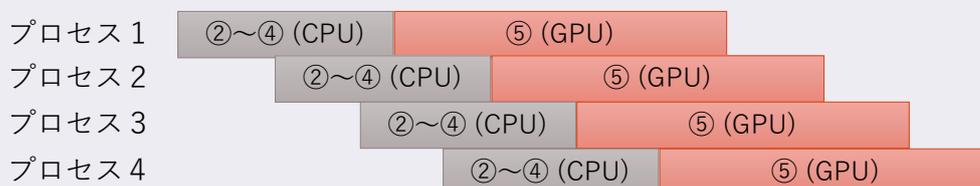
# 学習過程のGPU化

- Neural Networkの学習過程においては、最初に一度だけ全ての構造における対称関数 $G_{i,\alpha}$ とその座標微分 $\frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial R_j}$ を計算する(①)。①についてはGPU化しているのだが、計算回数が唯一度だけなので計算時間全体の短縮には大きく寄与しない。
- 各エポックにおいて②～⑤の処理を実行してエネルギーおよび力の誤差が計算される。②～⑤の高速化が重要。
- ②および③は元より低コストであるため、GPU化はせずにホスト側(CPU)で処理する。
- ④は中程度の計算時間を要する。しかしながら、学習過程においては $\frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial R_j}$ のデータ容量が大きく(100GB以上となることもある)、GPUのグローバルメモリーに載せることは難しい。
- 最大のボトルネックであるNeural Networkの二階微分の計算(⑤)のみをGPU化する。⑤はLevel-2およびLevel-3 BLASの計算であるため、cuBLASを使うことで容易にGPU化できる。

15

# 学習過程のGPU化

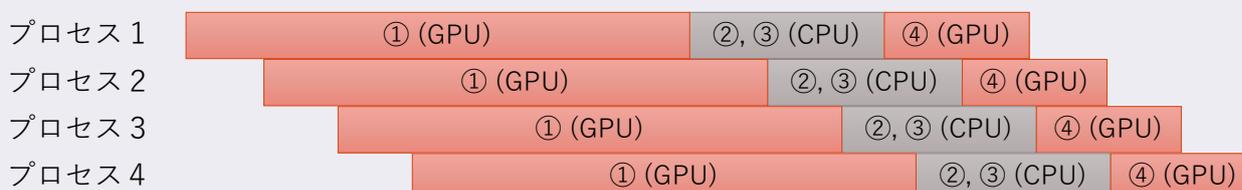
- ②～④はCPUで処理され、⑤はGPUで処理される。
- ⑤がGPUで高速化されたことにより、②～④の計算時間も無視できなくなる。
- MPIによるプロセス並列を併用することでさらなる性能向上を図る。例えば、MPIで4プロセスを起動した場合、1エポック当たり各プロセスは下図のように動作する。あるプロセスがCPUで処理している間に別のプロセスがGPUにて計算を実施するという状況が起こる。CPUとGPUを両方ともフル活用することで、学習過程全体が十分に高速化される。経験上、GPU 1 デバイス当たり 2～4つのMPIプロセスがあれば十分である。また、CPUにおける処理はOpenMPでスレッド並列されている。



16

# LAMMPSによるMD計算のGPU化

- LAMMPSでのMD計算では、各MDステップにおいて①～④の処理を実行する。
- 学習過程と同様に②と③はCPUで処理する。
- 対称関数の計算(①)と力の計算(④)をGPU化する。 $\frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial \mathbf{R}_j}$ のデータ容量は学習過程に比べると大きくないため、①で生成した $\frac{\partial G_{i,\alpha}}{\partial \mathbf{R}_j}$ をGPUのグローバルメモリーに保持したまま、④の計算にて利用する。当該データはGPU内部だけで扱われるため、ホストへの転送は不要である。
- MD計算では①が最大のボトルネック(計算時間の95%以上)であるが、対称関数の計算はGPUとの相性が良く大幅な高速化が期待できる。また、学習過程と同様に、1デバイス当たり2～4プロセスのMPI並列を適用することで計算効率が向上する。



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

17

## 3. GPU環境でのベンチマーク

- ✓ Mat3raでのベンチマーク
- ✓ NVIDIA A100搭載マシンでのベンチマーク

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

18

# Mat3raでのベンチマーク

Mat3raはExabyte.io社によって提供されているクラウド環境で、第一原理計算や分子動力学計算などのシミュレーションに特化した計算リソースが用意されています (<https://mat3ra.com>)。Amazon AWSおよびMicrosoft Azureが利用可能で、今回は両クラウド環境にてGPU化されたAdvance/NeuralMDのベンチマークを実施しました。計算リソースの手配にはMat3raの代理店である伊藤忠テクノソリューションズ(CTC)にご協力頂いております (<https://ctc-mi-solution.com/exabyte-io/>)。

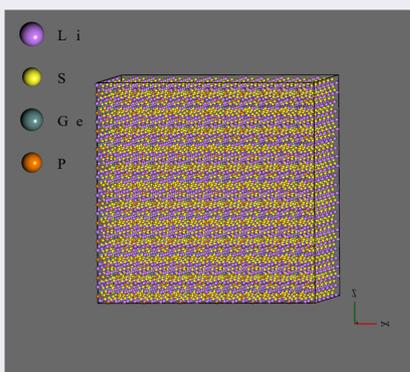


Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

19

# Neural Network力場のベンチマーク

Advance/NeuralMDで作成したNeural Network力場を使って、LAMMPSによる分子動力学計算のベンチマークを実施しました。LAMMPSはGCC11.2.0, OpenBLAS, OpenMPI4.1.1, CUDA11.5でコンパイルしています。計算に使用した系は、硫化物リチウムイオン伝導体 $\text{Li}_{10}\text{GeP}_2\text{S}_{12}$ のスーパーセルモデルです(下図)。原子数は21,600個であり、Neural Network力場を適用するには比較的大きな系になります。Neural Network力場および分子動力学計算の計算条件は下表の通りです。100ステップのMD計算実施後に計算時間を計測しています。



計算条件	設定値
対称関数の種類	Chebyshev多項式
対称関数の動径成分	50個
対称関数の角度成分	30個
カットオフ半径	6.0 Å
$\Delta$ -NNP法	適用有り
NNの構造	2層 x 40ノード (twisted tanh)
アンサンブル	NVT (T=500K)
時間刻み	0.5fs
MDステップ数	100

20

# Amazon AWSでのベンチマーク結果

AWSでの計算条件および計算時間は下表の通りです。CPUのみ、および、GPUを1～8デバイス使用した場合の5ケースにて計算しています。1 GPUデバイス当たり、4つのMPIプロセスを起動しています。

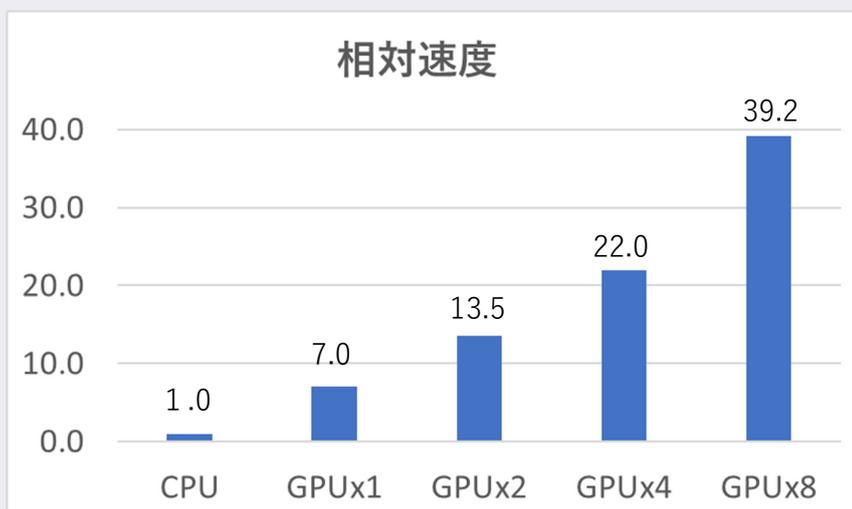
	CPUのみ	GPU x 1	GPU x 2	GPU x 4	GPU x 8
ジョブQueue	OFplus	GOF	G4OF	G4OF	G8OF
CPU種別	Intel Xeon Platinum / 72core	Intel Xeon E5-2686-v4			
GPU種別	-	NVIDIA V100			
MPIプロセス数	72	4	8	16	32
OpenMPスレッド数	1	2	2	2	2
GPUデバイス数	-	1	2	4	8
計算時間 / sec	150.8	21.6	11.2	6.9	3.9

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

21

# Amazon AWSでのベンチマーク結果

CPUでの計算時間を1とした相対計算時間を下図に示す。



22

# Microsoft Azureでのベンチマーク結果

Azureでの計算条件および計算時間は下表の通りです。CPUのみ、および、GPUを1～4デバイス使用した場合の4ケースにて計算しています。1 GPUデバイス当たり、3つのMPIプロセスを起動しています。

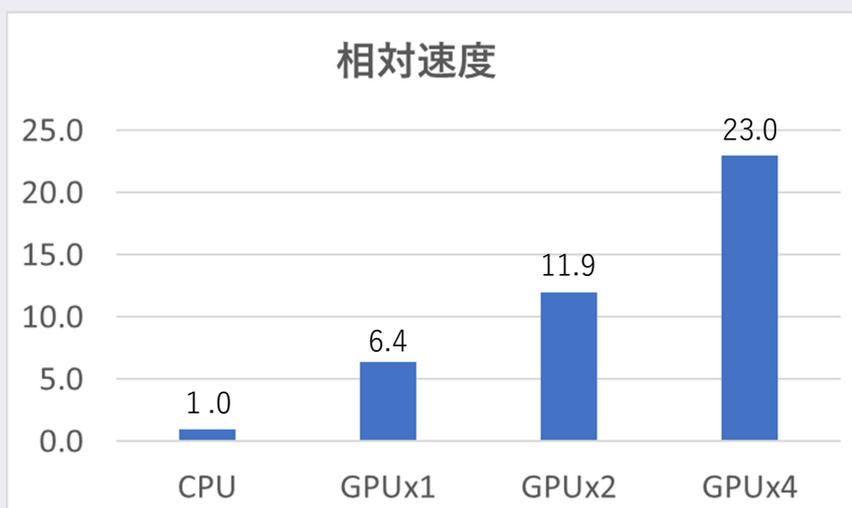
	CPUのみ	GPU x 1	GPU x 2	GPU x 4
ジョブQueue	OFplus	GPOF	GP2OF	GP4OF
CPU種別	<b>Intel Xeon Platinum 8168 / 44core</b>	Intel Xeon E5-2690-v4		
GPU種別	-	<b>NVIDIA P100</b>		
MPIプロセス数	44	3	6	12
OpenMPスレッド数	1	2	2	2
GPUデバイス数	-	1	2	4
計算時間 / sec	195.4	30.5	16.4	8.5

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

23

# Microsoft Azureでのベンチマーク結果

CPUでの計算時間を1とした相対計算時間を下図に示す。



24

# Mat3raでのベンチマーク結果

- Amazon AWSではGPU(NVIDIA V100) 1 デバイスで、Intel Xeon Platinumの7.0倍ほど高速化された。
- Microsoft AzureではGPU(NVIDIA P100) 1 デバイスで、Intel Xeon Platinumの6.4倍ほど高速化された。
- AWSおよびAzureともに、GPUのデバイス数を増やすと計算速度は十分に良くスケールすることが確認された。
- 今回のベンチマークに使用した2万原子系ではGPUが4デバイスほどあれば十分に実用的な計算が実施できることが確認できた。原子数が5000以下であれば、GPU 1 デバイスでも十分高速にMD計算が実施できるものと推測される。

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

25

# NVIDIA A100搭載マシンでのベンチマーク

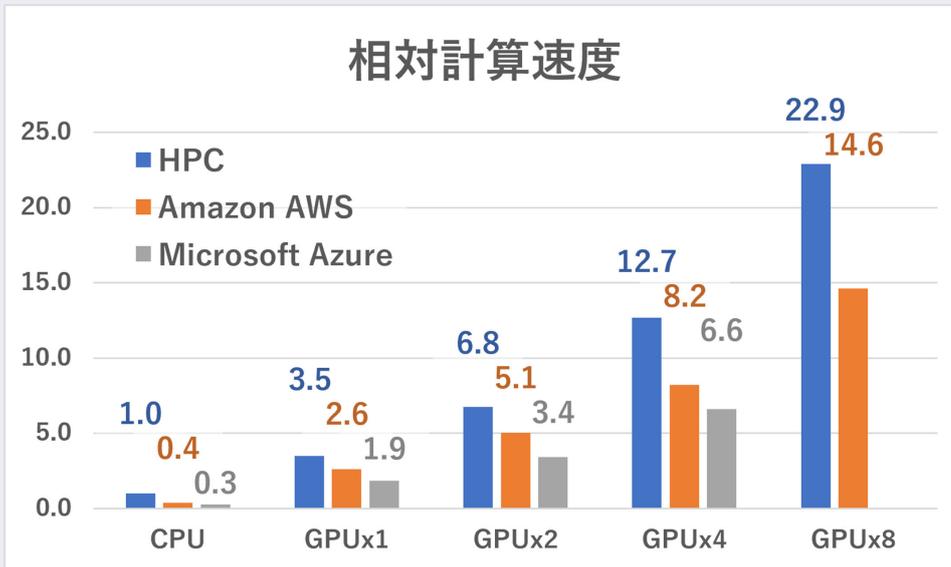
- HPCシステムズ(<https://www.hpc.co.jp>)にご提供頂いた、NVIDIA A100 x 8 搭載マシンにて同様のベンチマークを実施
- 計算対象および条件は、先ほどと同様のLGPSスーパーセルモデル(21,600原子系)

	CPUのみ	GPU x 1	GPU x 2	GPU x 4	GPU x 8
CPU種別	AMD EPYC 7742 / 64core	AMD EPYC 7742 / 64core			
GPU種別	-	NVIDIA A100			
MPIプロセス数	64	4	8	16	32
OpenMPスレッド数	1	2	2	2	2
GPUデバイス数	-	1	2	4	8
計算時間 / sec	56.4	16.0	8.3	4.4	2.5

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

26

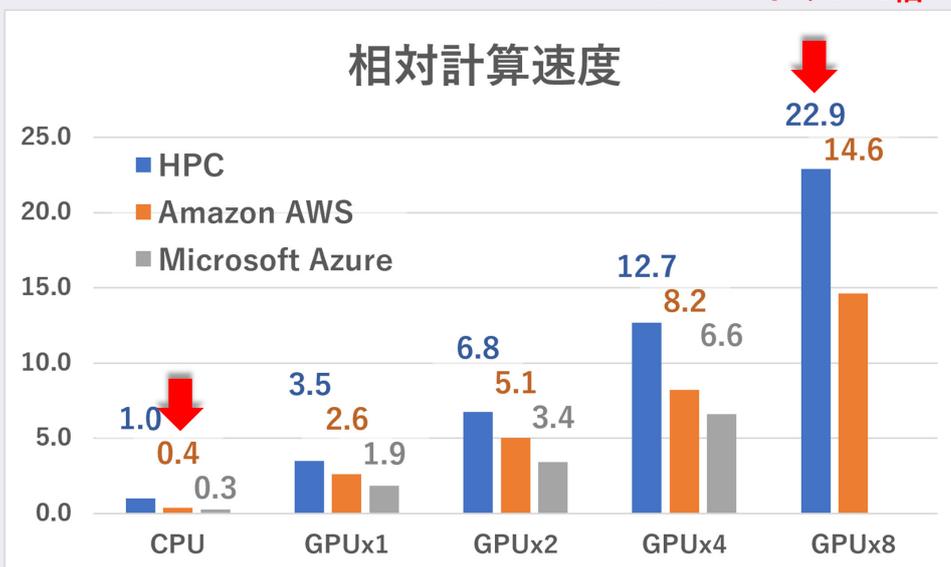
# NVIDIA A100搭載マシンでのベンチマーク



27

# NVIDIA A100搭載マシンでのベンチマーク

AWSのIntel Xeon Platinumと比較すると  
NVIDIA A100 x 8 により**57.3倍**の高速化を実現！



28

# 大規模GPU環境を準備中！

- 現在、NVIDIA A100が最大で32枚まで利用可能なクラウド環境を準備中です。(早ければ年内のリリース)
- Intel Xeon Platinum 72core@AWSの約230倍の速度(外挿値)
  - ⇒ 同じ速度をCPUで再現するには16,488並列
  - ⇒ 実際には並列効率が50%以上低下するため、3万CPUコア以上が必要
- このクラウド環境を使うと、**10万原子以上の大規模モデル**にてNeural Network力場を使ったシミュレーションが可能。

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

29

# 無償アップグレードキャンペーン

Advance/NeuralMD Proリリース時点 ~ 2023年4月末の間、無償アップグレードキャンペーンを実施しております。キャンペーン期間中は、Advance/NeuralMDのライセンスを既にお持ちのお客様は無償でAdvance/NeuralMD Proをお使い頂けます。また、Advance/NeuralMDを新規に購入されるお客様についても、キャンペーン期間中は追加料金無くAdvance/NeuralMD Proがご利用になれます。

製品	年間(企業・国研)	年間(大学)	買取(企業・国研)	買取(大学)
Advance/NeuralMD	50万円	25万円	150万円	75万円
Advance/NeuralMD Pro	90万円 <b>50万円</b>	45万円 <b>25万円</b>	270万円 <b>150万円</b>	135万円 <b>75万円</b>

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

30

## 4. 力場データベースのご紹介

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

31

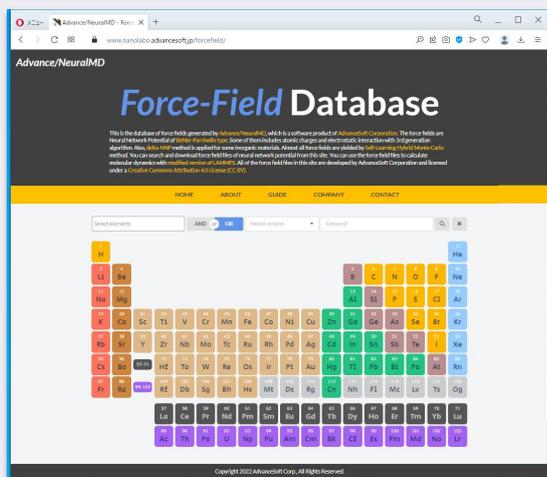
## 力場データベース

- Neural Network力場のデータベース Ver.1.0を公開しました。  
<https://www.nanolabo.advancesoft.jp/forcefield/>
- Ver.1.0では、有機分子系(C/H/O/N/S/F)およびリチウムイオン伝導体のデータを収録
- 今後、ユーザーの意見を取り入れつつ、データベースを随時拡充予定。  
⇒ 本セミナーの終了時にアンケートがあります。
- ライセンスはオープンソース：Creative Commons 4.0 (CC-BY)

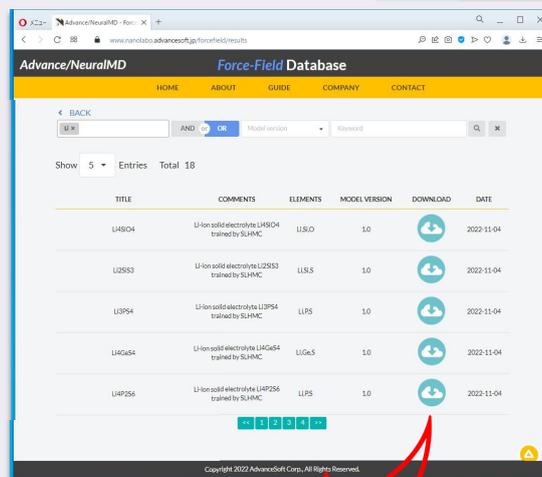
Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

32

# 力場データベース



元素を指定して  
検索



力場ファイル、教師データ、テストデータ、  
QE入力ファイル、NeuralMDログをダウンロード

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.



# 今後の開発ロードマップ



アドバンスソフト株式会社  
NanoLabo新機能、新製品NeuralMD Proご紹介セミナー  
[ 15:35~15:50 ]

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

## 開発ロードマップ ①

2023年2月頃

### ✓ Advance/NanoLabo

- NeuralMDインターフェースを強化 (SLHMCとグランドプロジェクトの連携など)
- Open Catalyst 2022対応 ※Open Catalyst Projectの最新バージョン
- M3GNet対応 ※無機固体向けのグラフニューラルネットワーク汎用力場

### ✓ Advance/NeuralMD

- reax- $\Delta$ -NNP法の実装 (CPU版のみ)
  - ⇒ ReaxFFを適用した新しい $\Delta$ -NNP法
  - ⇒ 有機分子系のNeural Network力場作成が大幅に効率化、作成後の力場も安定

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

## 開発ロードマップ ②

2023年5月頃

- ✓ Advance/NanoLabo
  - 3D-RISMおよびESM-RISMに対応 (Pro限定)
- ✓ Advance/NeuralMD
  - reax- $\Delta$ -NNP法のGPU化
- ✓ 力場データベース
  - reax- $\Delta$ -NNP法を活用した有機分子 & 有機無機界面の力場データを増設

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

## 開発ロードマップ ③

2023年9月頃

- ✓ Advance/NanoLabo
  - NWChemインターフェースを搭載
- ✓ Advance/NeuralMD
  - LAMMPSでの外挿判定機能
  - Windows版でのMPI並列
- ✓ 新製品Advance/NanoModelerリリース
  - PythonでNanoLaboのモデリング機能を利用できるようにしたモジュール

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

# 価格および関連サービス のご紹介



アドバンスソフト株式会社  
NanoLabo新機能、新製品NeuralMD Proご紹介セミナー  
[ 15:50~16:00 ]

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

## 価格のご紹介

製品名	年間ライセンス (企業・国研)	買取ライセンス (企業・国研)	年間ライセンス (アカデミック)	買取ライセンス (アカデミック)
Advance/NanoLabo	50万円	150万円	25万円	75万円
Advance/NanoLabo Pro	90万円	270万円	45万円	135万円
Advance/NeuralMD	50万円	150万円	25万円	75万円
Advance/NeuralMD Pro	90万円	270万円	45万円	135万円

※価格は全て税抜です。

- 複数ライセンス同時購入割引やサイトライセンスもごさいます。
- NanoLaboとNeuralMDの同時購入割引もごさいます。
- Quantum ESPRESSOとLAMMPSの年間サポートもごさいます。

詳細につきましては、担当営業までお問い合わせください。

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

# Advance/NeuralMD Pro 無償アップグレードキャンペーン



**新製品のAdvance/NeuralMD Proが追加料金0円でお使いいただけます**

実施期間：2022年9月30日～2023年4月30日

キャンペーン期間中は、Advance/NeuralMDのライセンスを既にお持ちのお客様は無償でAdvance/NeuralMD Proをお使い頂けます。また、Advance/NeuralMDを新規にご購入されるお客様についても、キャンペーン期間中は追加料金無くAdvance/NeuralMD Proがご利用になれます。

## Advance/NeuralMD

年間(企業・大学)	年間(大学)	買取(企業・国研)	買取(大学)
50万円	25万円	150万円	125万円

## Advance/NeuralMD Pro

年間(企業・大学)	年間(大学)	買取(企業・国研)	買取(大学)
<del>90万円</del> 50万円	<del>45万円</del> 25万円	<del>270万円</del> 150万円	<del>135万円</del> 75万円

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

# パッケージソフトウェアの解析事例

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

自動車・運輸  
材料・化学  
産業機械  
航空宇宙  
エレクトロニクス  
建設土木  
原子力  
エネルギー  
環境・防災

### 解析分野別

流体  
爆発・燃焼  
構造  
振動音響  
ナノ・バイオ  
プリポスト  
半導体デバイス  
光・電磁波

Copyright 2021 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

# アドバンスソフトの開発・解析サービス

お客さまのご要望に応じて科学技術計算ソフトウェアの新規開発、機能追加、受託解析等のサービスをおこないます。

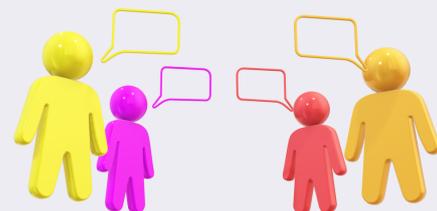


1. 流体・構造・ナノ関連など幅広い分野のソフトウェアを開発し、解析経験がある技術者がお客様のご要望をお伺いいたします。

2. 最適な解析方法をご提案いたします。

3. お客様のご了解が得られましたら、モデリングを行い、解析を実施いたします。

4. 解析結果を可視化し、解析結果の評価や考察を行なって報告書を作成いたします。



Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

ご清聴ありがとうございました。  
アンケートのご協力をお願い申し上げます。

お問い合わせ先： ご担当営業まで

TEL：03-6826-3971 FAX：03-5283-6580

E-mail：office@advancesoft.jp

Copyright 2022 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6



**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。