

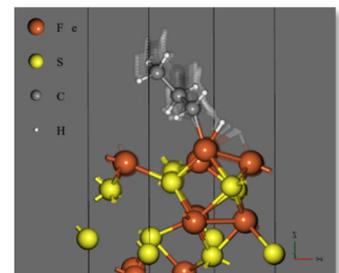


オンラインセミナー NanoLabo/NeuralMD 製品紹介セミナー

2024年 6月 21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
	代表取締役社長 松原 聖	
2.	NanoLabo の最新機能のご紹介	5
	第 6 事業部 西原 慧径	
3.	Neural Network カ場のベンチマーク事例	21
	第 6 事業部 西原 慧径	
	招待講演	
4.	「富士通 CaaS クラウドのご紹介」	29
	富士通株式会社 山田 翔太 様	
5.	NanoLabo Cloud Desktop のご紹介	49
	第 6 事業部 中山 和貴	
6.	AI を活用した製品開発	55
	第 6 事業部 西原 慧径	
7.	価格および関連サービスのご紹介	59
	営業本部 田口 浩一	

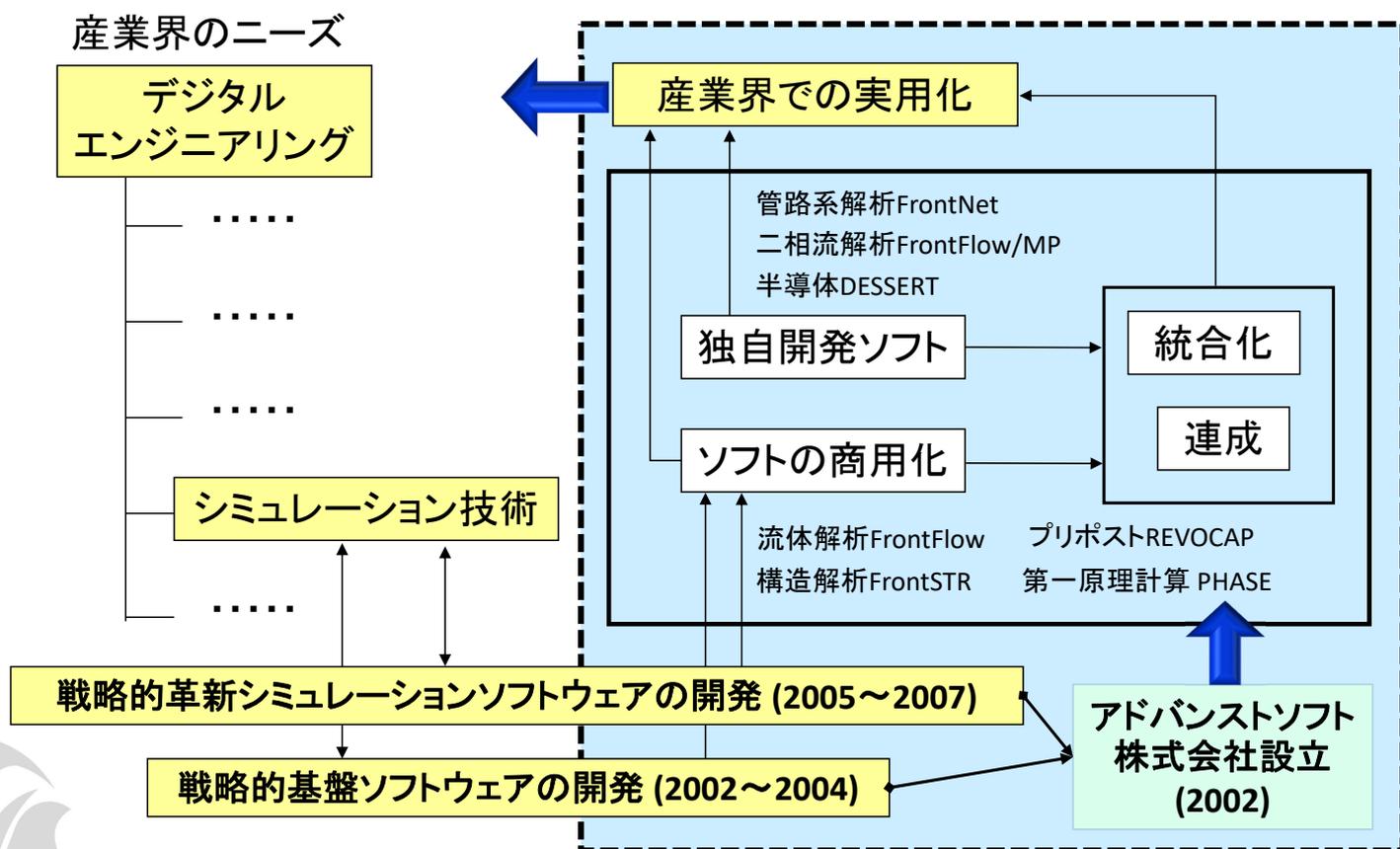


アドバンスソフト株式会社のご紹介

NanoLabo/NeuralMD 製品紹介セミナー

2024年6月21日（金）開催
アドバンスソフト株式会社

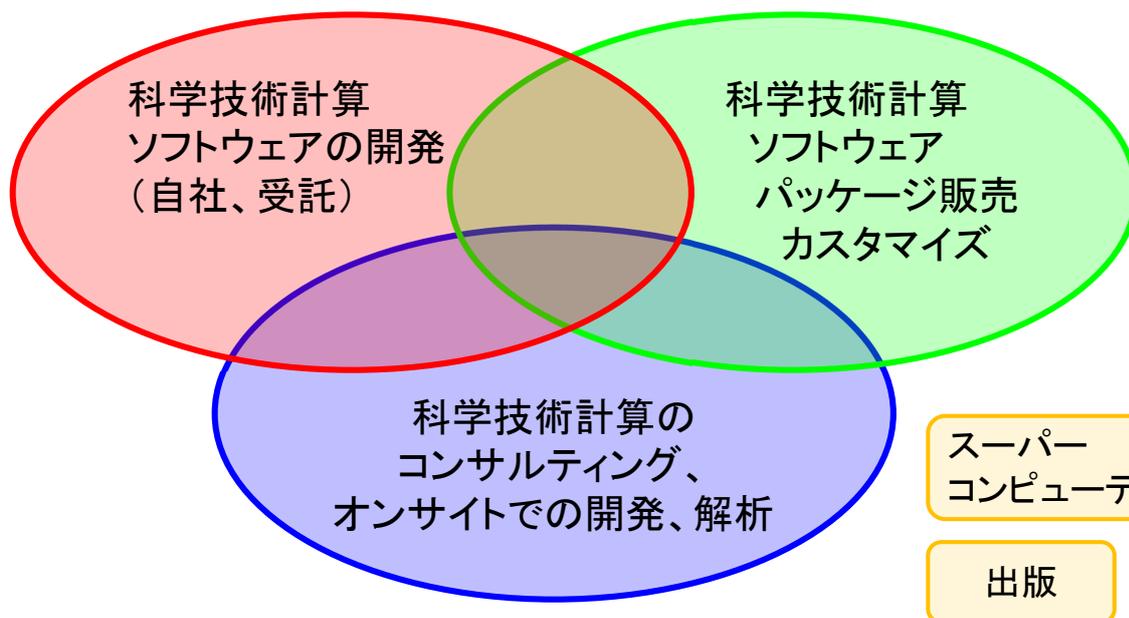
アドバンスソフトとは





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。



アドバンスソフトの特徴

- シミュレーションソフトウェアの開発力
 - 自社でソースコードを所有し、事業化
 - ニーズに対し自社でカスタマイズが可能
 - 計算原理とその限界を熟知した技術者

```

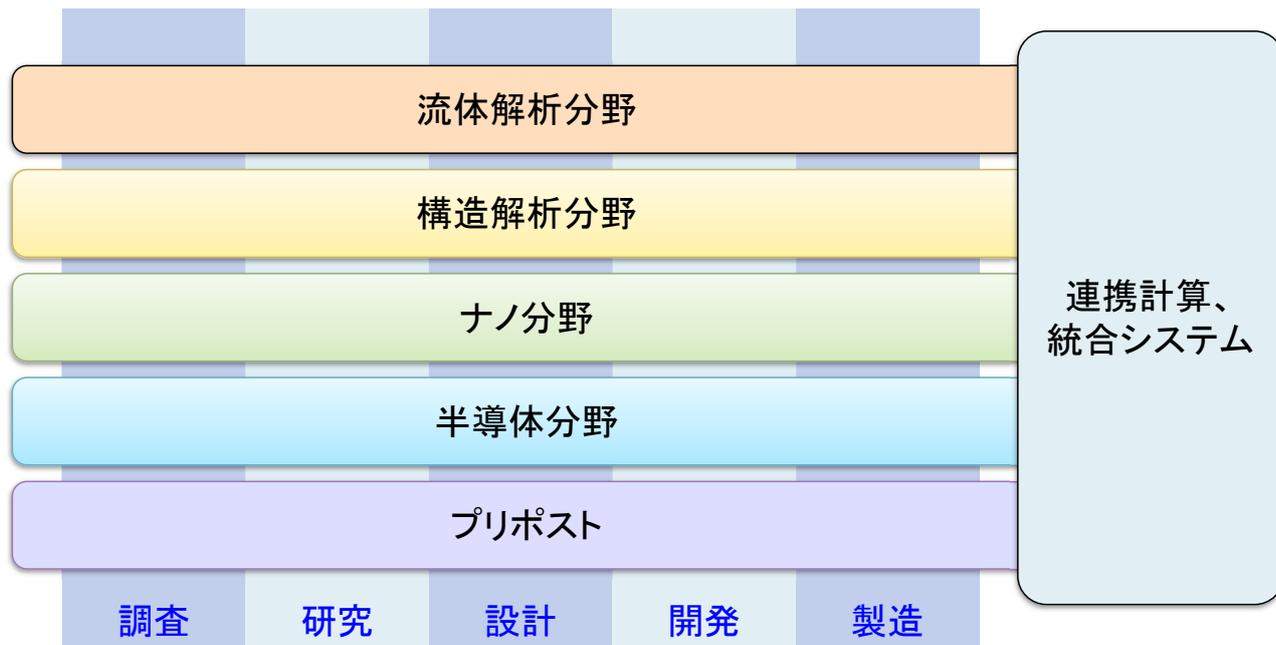
eps=1.0d-10
do i=1,nbc1
  do j=nbvc(i),nubc(i+1)-1
    if (indbc(1,j).lt.nesta.or.indbc(1
    if (abs(bcval(3,i)).le.eps.and.abs(i
  else
    do k1=1,3
      do k2=1,3
        xx(k2,k1)=xpos(k2,ielm(i
        xx(k2,k1)=xpos(k2,ibcelm(inr
      end do
    end do
    area=area3d(xx)
    qcoef1=area/12.0d0*cp1x(bcval(1
    /cp1x(bcval(3,i),bcval(4,
    qcoef2=area/3.0d0*cp1x(bcval(5,
    /cp1x(bcval(3,i),bcval(4,
    do k1=2,4
      inode=ielm(indbc(k1,j),indl
      inode=ibcelm(indbc(k1,j),j)
      do k2=2,4
        inode=ielm(indbc(k2,j),i
        inode=ibcelm(indbc(k2,j),j)
      do k2=2,4
        at=acoeff1
  
```



✓ 幅広い分野

- ナノから構造・流体分野の幅広い技術
- 製造業・原子力から材料・半導体産業までの幅広いニーズに対応
- お客様に多種多様な提案が可能

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 Advance/PHASE</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>ナノ材料 GUI 付属</p>	<p>ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo</p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。</p> <p>ナノ材料 プリポスト</p>	<p>流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red</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>流体</p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i</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>流体</p>
<p>大規模 3次元 TCAD システム Advance/TCAD</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>半導体デバイス 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 Advance/NeuralMD</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>ナノ材料 AI・機械学習</p>	<p>気液二相解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP</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>流体</p>	<p>管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet</p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave</p> <p>マクスウェル方程式を FDTD 法で 3次元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>光波・電磁波</p>	<p>構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR</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>構造</p>	<p>大気拡散影響予測システム Advance/Emerg</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>流体 GUI 付属</p>	<p>深層学習用ツール Advance/iMacle</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>AI・機械学習</p>
<p>汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP</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>プリポスト</p>	<p>音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise</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>音響</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>	

ソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをご覧ください。

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	プリポスト
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>



Advance/NanoLaboの



最新機能のご紹介

アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD製品紹介セミナー
[14:05~14:45]

Copyright 2024 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。
- ✓ 2023年 8月、Ver.2.9をリリース。
2023年11月、Ver.2.9.1をリリース。
2024年 4月、Ver.2.9.2をリリース。Chatbotを公開。
2024年 4月、**NanoLabo Cloud Desktop**をリリース。
2024年 7月、Ver.3.0をリリース予定。(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 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

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 2024 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、PJM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)
 - **NanoLabo Cloud Desktop**

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

8

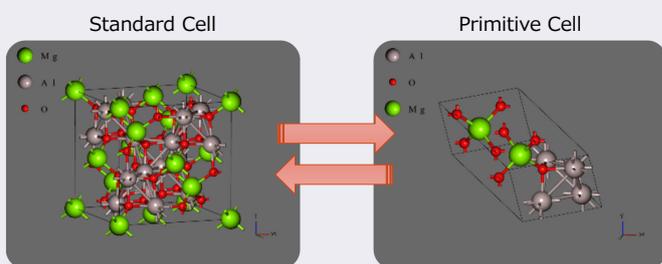
モデリング機能の詳細

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

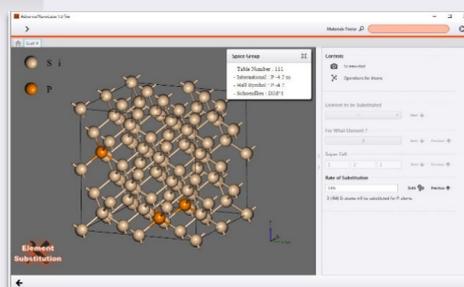
9

1. 結晶系

セル変換



不純物置換

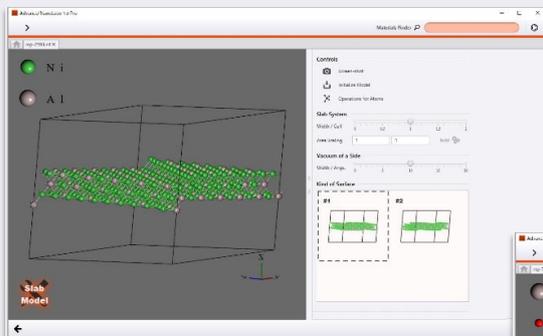


Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

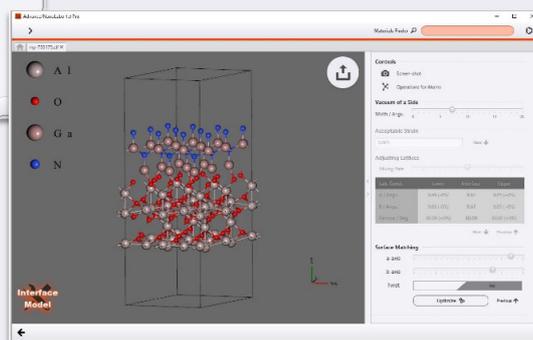
10

2. 表面・界面系

表面モデル



界面モデル

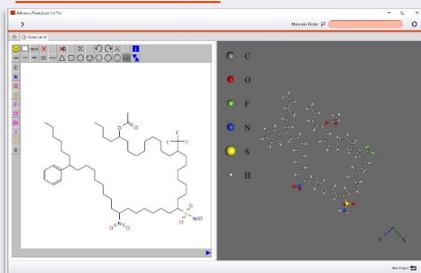


Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

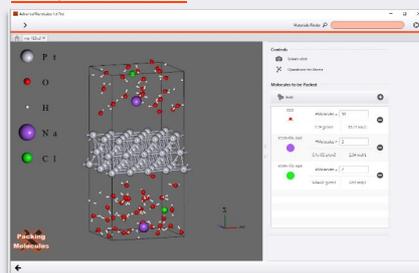
11

3. 分子系

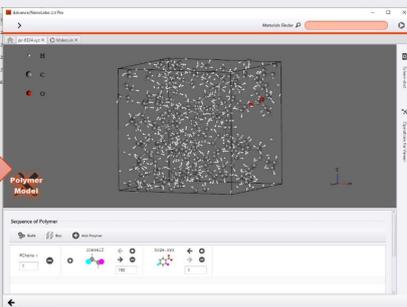
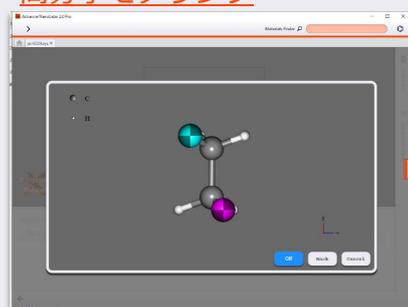
有機分子の描画



溶媒分子充填



高分子モデリング



12

計算機能の詳細

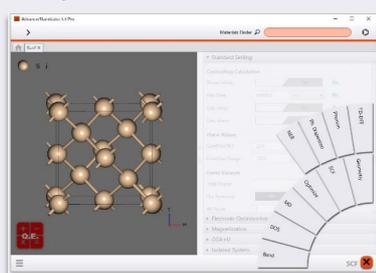
Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

13

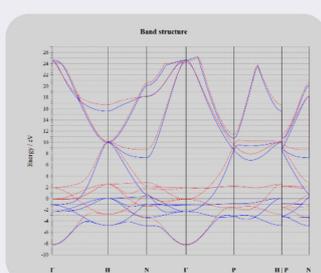
1. Quantum ESPRESSO

- ✓ 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)

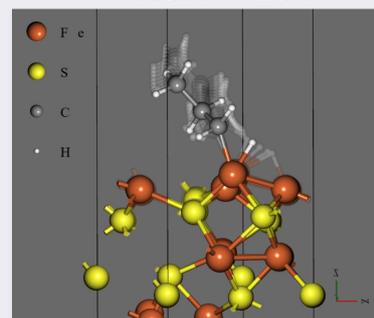
Quantum ESPRESSO入力画面



バンド構造図のプロット



NEB反応経路の残像表示



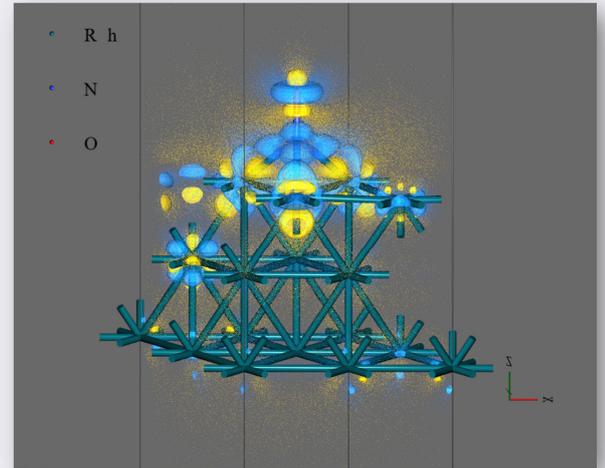
※静岡大学 波部先生よりご提供頂いたデータ。
FeS表面でのプロパン分子の脱水素反応。

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 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

15

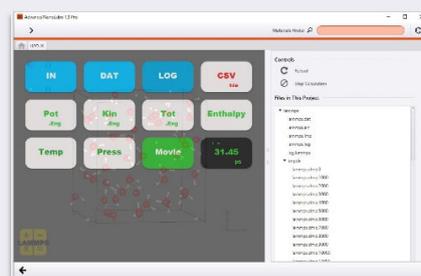
2. LAMMPS

- ✓ 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。

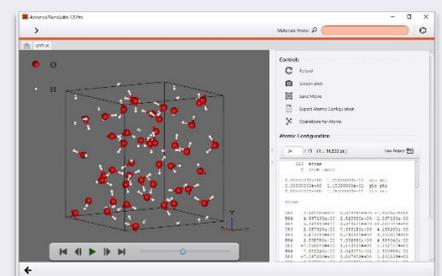
多段階計算スキーム設定画面



計算項目の一覧表示



アニメーション表示



16

2. LAMMPS

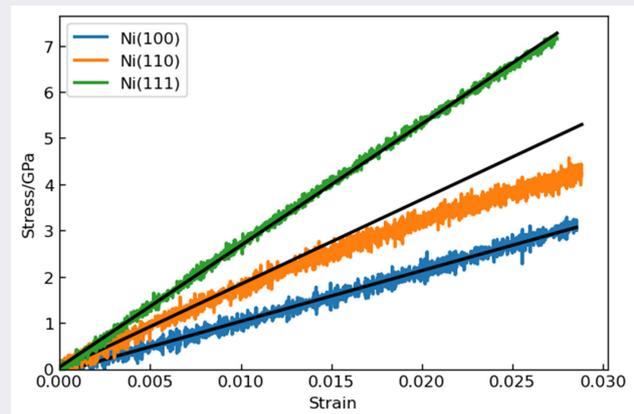
- ✓ 外部電場、指定原子に対する外力および並進移動、セル変形。
- ✓ 原子グループの視覚的な定義。
- ✓ ユーザー定義コマンドの追加。任意の変数のグラフ化。

【Ni結晶のセル変形】

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 [†]
(100)	110.0 GPa	121.3 GPa
(110)	184.0 GPa	203.8 GPa
(111)	263.5 GPa	262.2 GPa

[†] 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.



17

Ver.2.9 ~ 3.0 の新機能

Ver.2.9 ~ Ver.2.9.1 の新機能

バージョン	リリース時期	実装された新機能
2.9	2023年8月	<ul style="list-style-type: none"> 汎用タイトバインディングソフトウェア ThreeBodyTB に対応 グラッドプロジェクトの機能強化 PDFファイルの可視化機能 など
2.9.1	2023年11月	<ul style="list-style-type: none"> Matlantisとの連携機能 (Jupyter Interfaceを使用) 汎用GNN力場のMatGLに対応 (従来のM3GNetの後継版) 汎用GNN力場のCHGNetに対応 ⇒ ファインチューニングしたGNNモデルにも対応 外部電場用の電荷設定など、LAMMPSの機能強化 その他、各種機能改善
2.9.2	2024年4月	<ul style="list-style-type: none"> 製品の使い方に関するChatbotを搭載 マルチGPUに対応した汎用GNN力場であるSevenNetに対応 NanoLabo Cloud Desktopをリリース その他、各種機能改善

19

[v2.9] ThreeBodyTB

ThreeBodyTB

- NISTが開発した汎用タイトバインディング法。ハミルトニアン の定義に3体項(ThreeBody)まで考慮している。
- 一般に、タイトバインディング法は第一原理計算よりも精度が低く、計算速度が速い (DFTの廉価版のようなもの)。
 - ⇒ 比較的大きい系に対しても電子状態計算が適用できる。
 - ⇒ 系に応じてハミルトニアンなどを定義するパラメータを用意する必要があるため、汎用的な運用が困難
- ThreeBodyTB では 65 種の元素について事前にパラメータが最適化されており、多くの無機材料に対して汎用的な運用が可能に。
- パラメータのフィッティングには、DFTで計算された全エネルギーおよびバンドエネルギーを使用。DFT計算のデータとしては、65種の1元系、2080種の2元系の無機結晶が用いられている。s, p, d 軌道にのみ対応(軌道には非対応)。DFTはPBEsol/スピン分極無しの条件にてQEで実行。
- Juliaで実装されており、ユーザーがスクリプトを作成。
 - ⇒ **Advance/NanoLabo**では画面から直接実行できます。

H																	He	
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
Na	Mg											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	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu		
			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

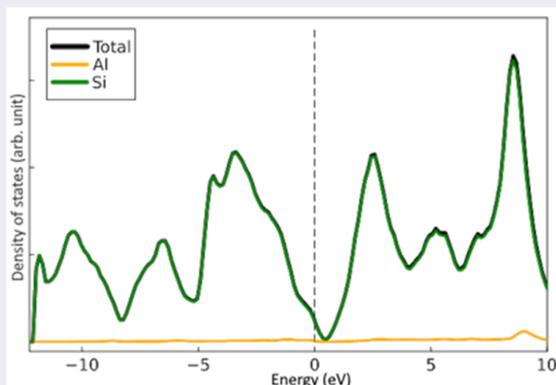
20

Si₆₄へのAl/P元素置換

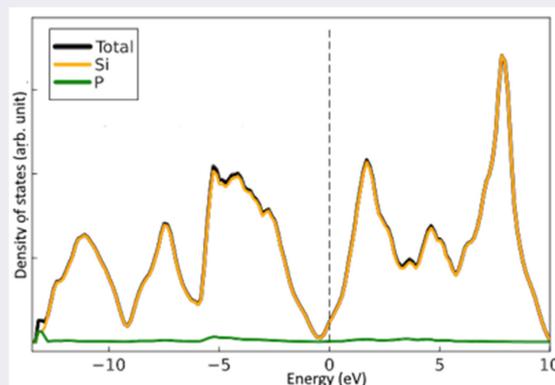
- Si結晶のスーパーセル(64原子系)にAlおよびP原子を1つだけ置換して、状態密度を計算
- 不純物ドーピングによるフェルミ準位のシフトが正しく再現されることを確認

<http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/ThreeBodyTB-dos/index.html>

Si₆₃Alの状態密度図



Si₆₃Pの状態密度図

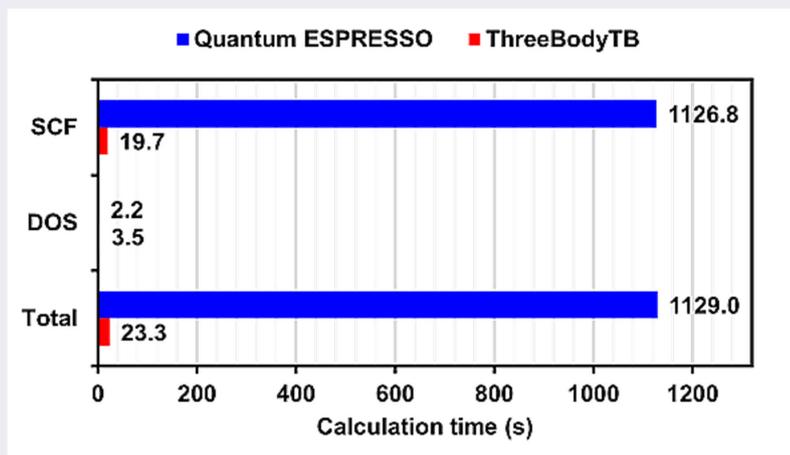


21

Si₆₄へのAl/P元素置換

- Si結晶のスーパーセル(64原子系)にAlおよびP原子を1つだけ置換して、状態密度を計算
- 不純物ドーピングによるフェルミ準位のシフトが正しく再現されることを確認

<http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/ThreeBodyTB-dos/index.html>

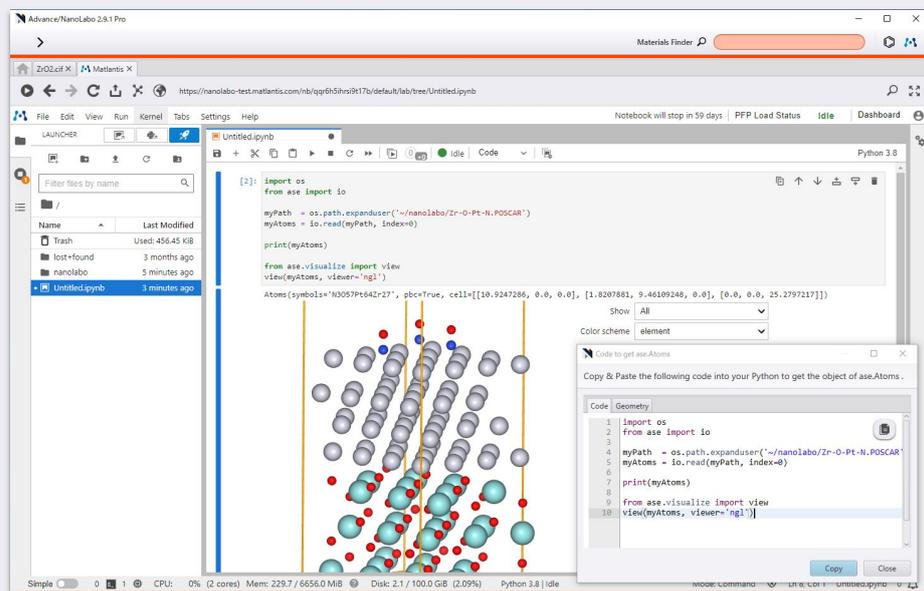


第一原理計算(QE)と比較すると50倍以上高速化されている。

⇒ 不純物や欠陥などを含む半導体など比較的サイズが大きく第一原理では計算時間の掛かる系に対して、電子状態などの簡易的な計算を実施するのに有効。

22

[v2.9.1] Matlantisとの連携



- **Advance/NanoLabo** でモデリングした構造データを、PFCC社が提供するプラットフォーム **Matlantis** に転送して、そのまま Atoms オブジェクトを生成できます。
- NanoLabo に搭載された *Jupyter Interface* を利用します。
- Matlantis : <https://matlantis.com/ja/>

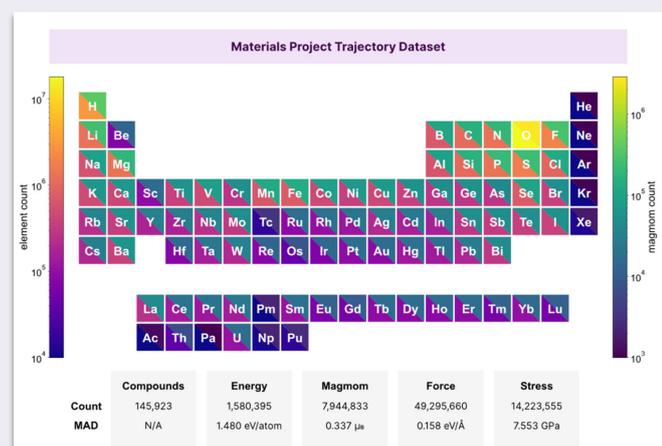


Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

23

[v2.9.1] M3GNet & CHGNet に対応

- **Advance/NanoLabo** の GUI 画面から、オープンソースの GNN 力場である M3GNet および CHGNet が利用可能
- M3GNet および CHGNet は、無機固体に対して汎用的に利用可能な GNN 力場 (94 元素に対応)
- 有機分子などは苦手



<https://www.nature.com/articles/s42256-023-00716-3>

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

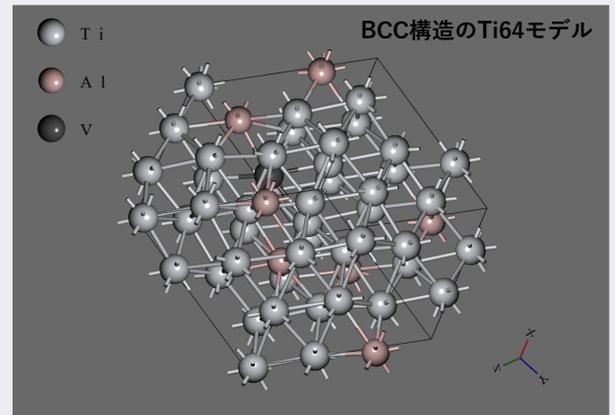
24

[v2.9.1] M3GNet & CHGNet に対応

- M3GNet および CHGNet には、完全な汎用性は無いので個別の系に対しては精度面で劣る場合がある。
- ⇒ **ファインチューニング**による精度向上

【Ti64合金の体積弾性率をファインチューニングで改善】

計算手法	体積弾性率 / GPa
実験値	119.7
Quantum ESPRESSO	109.0
M3GNet	99.2
M3GNet (F.T.)	109.7
CHGNet	89.8
CHGNet (F.T.)	101.3



Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

25

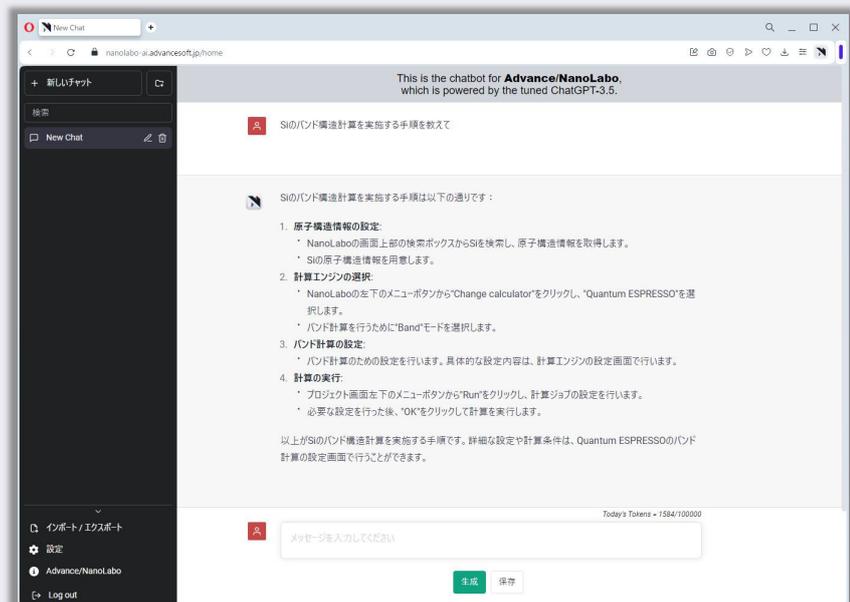
[v2.9.2] Chatbotを搭載

- ChatGPT3.5-turboをベースとしたChatbotシステムを公開しました。
 - ブラウザおよび製品のGUI画面上から利用できます。
 - **Advance/NanoLabo**のマニュアル等を事前に学習させており、製品の使い方などに関する簡単な質問に回答できます。
- ⇒ 製品導入時のユーザビリティ向上
に寄与します。

Chatbotシステムのウェブページ：

<https://nanolabo-ai.advancesoft.jp>

Chatbotの利用には、事前のユーザー登録が必要です。



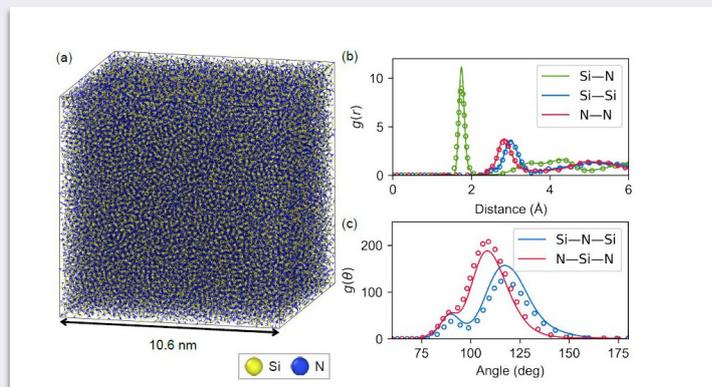
Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

26

[v2.9.2] マルチGPU対応のSevenNet

- Seoul National University が開発した汎用GNN力場“**SevenNet**”のインターフェースを**Advance/NanoLabo**に搭載しました。
- M3GNetやCHGNetなどのこれまでの汎用GNN力場の場合、GPU 1 デバイスのみでのMD計算にしか対応しておらず数千原子系程度のシミュレーションが限界でした。
- SevenNet**では 複数GPUでの並列が可能であるため、10万原子程度の大規模なモデルでも分子動力学計算が可能になります。

⇒ 詳細は、後の講演にて。



“arXiv:2402.03789v1, 6 Feb 2024”より引用

- SiNアモルファス (112,000原子)
- NVIDIA A100 x 8 ⇒ 0.1 ns / day

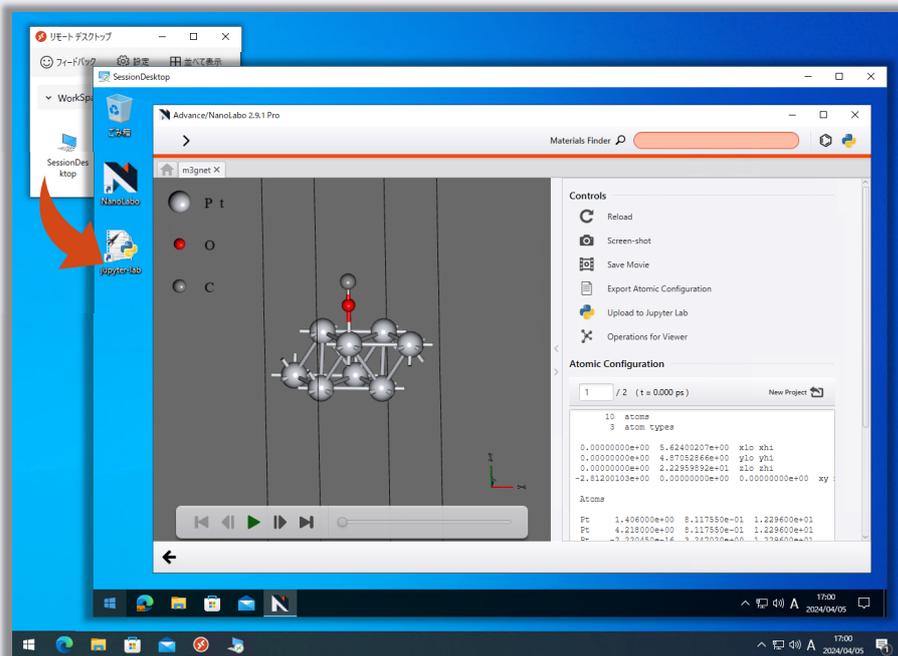
Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

27

[v2.9.2] NanoLabo Cloud Desktop

- クラウド上のデスクトップ環境で**Advance/NanoLabo**を使えるサブスクリプション型の新サービス。
- 使い易いGUIで定評のある材料シミュレータ**Advance/NanoLabo**を、ワークステーションレベルの計算リソースとセットで提供します。
- グラフニューラルネットワーク力場を使うために必要なPython環境も事前にセットアップ済みで、直ぐに計算を開始できます。

⇒ 詳細は、後の講演にて。



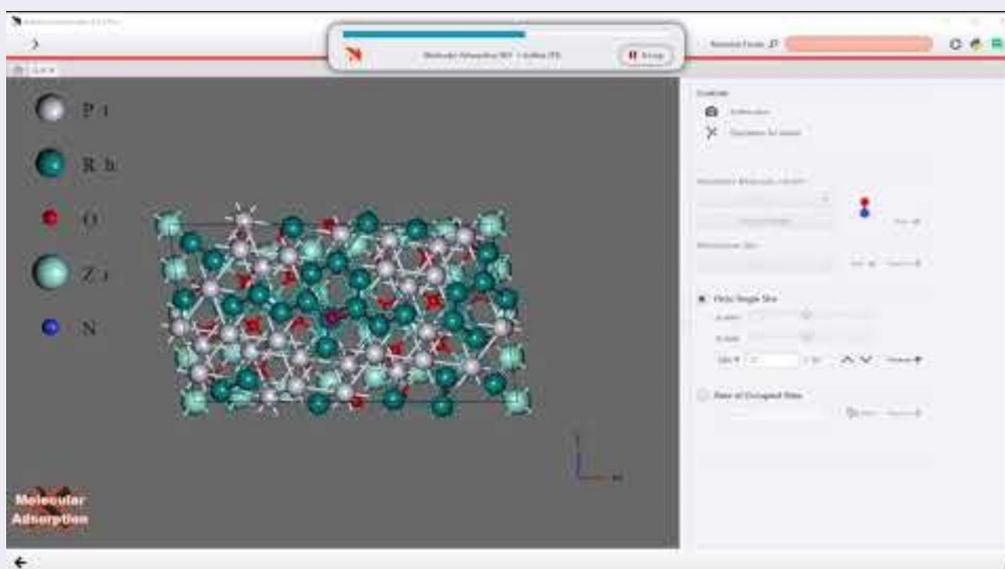
Ver.3.0 の新機能 (予定)

バージョン	リリース時期	実装された新機能
3.0	2024年7月 (予定)	<ul style="list-style-type: none">Autopilotによる材料モデルの自動生成ライセンス制御をFlexLMからSentinelに変更 (約1年間はFlexLMも利用可能) ⇒ Ver.3.0への移行時にライセンスファイルの再発行が必要になります。波動関数の3次元データ可視化Quantum ESPRESSOのバンド数のデフォルトをフルバレンスに変更モデラーの各種機能を改善プロキシサーバーに関する設定内容を改善 など

[v3.0] Autopilotによる材料モデル生成

Advance/NanoLaboのモデラー画面に、Autopilot(=材料モデル生成AI)を搭載

⇒ 詳細は後ほど



Neural Network力場の ベンチマーク事例



アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD製品紹介セミナー
[14:45~15:00]

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

アウトライン



1. Advance/NeuralMDによるNVIDIA H100でのベンチマーク
2. マルチGPU対応のSevenNetによるベンチマーク

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

1. Advance/NeuralMDによる NVIDIA H100でのベンチマーク

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

Advance/NeuralMD

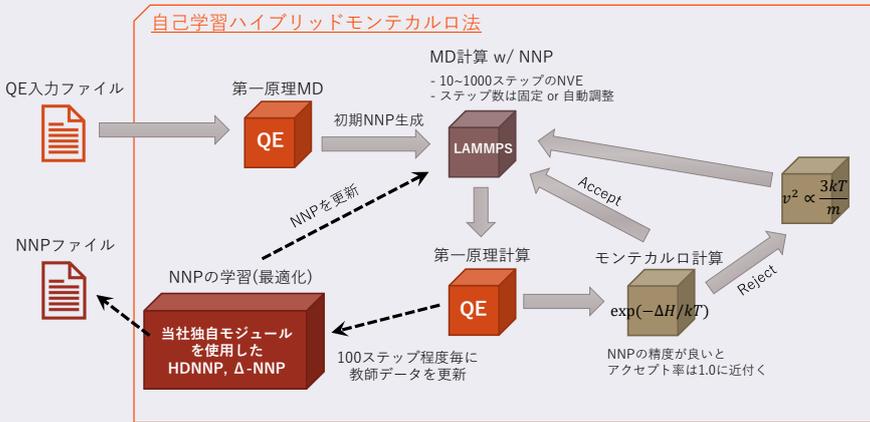
- Advance/NeuralMDは当社独自開発のNeural Network力場の製品
- **Advance/NanoLabo** のGUI画面から操作可能
- 特徴的な機能：
 1. 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法
 2. 独自モデルによる教師データの削減
 3. GPUによる大規模系のMD計算

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

Advance/NeuralMD

1. 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法 (=力場生成の自動化)



ユーザーはQEの入力ファイルを1つ用意するだけで、自動的に力場が生成

実質的には、**Advance/NanoLabo**の画面上でボタンを押すだけ

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

Advance/NeuralMD

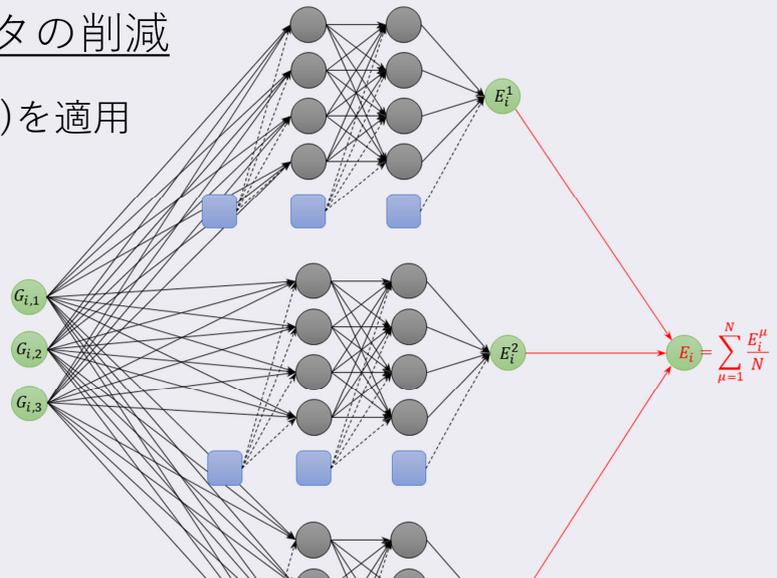
2. 独自モデルによる教師データの削減

Δ-NNP および 複数NNモデル(右図)を適用

他社の既報事例[†]では、約10万構造の教師データを要するCeO₂/UO₂/PuO₂の熔融解析を、わずか600~1600構造ほどで再現。**力場作成時間を約100倍に高速化。**

(†) <https://ctc-mi-solution.com/>ニューラルネットワーク分子動力学法を用いたceo2/

	融点の計算値	融点の実験値	教師データ数
CeO ₂	2299°C	約2400°C	1634
UO ₂	2476°C	約2800°C	650
PuO ₂	2376°C	約2400°C	1078



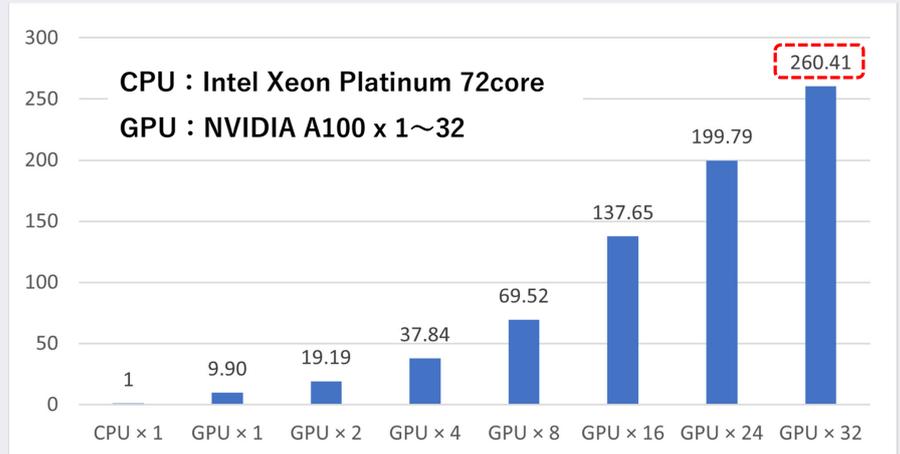
Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6

Advance/NeuralMD

3. GPUによる大規模系のMD計算

- 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(98,000原子)でのベンチマーク
- NVIDIA A100を32枚使用してCPU1枚の260倍の高速化に成功†**
- GPUを2～4枚使うことで、数万原子系のMD計算が現実的な時間で実施可能



(†) HPCシステムズにご協力頂き、Oracle Cloud Infrastructureを使用しています。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

7

Advance/NeuralMD

- 今回は、Neural Network力場に関する解説、および、Advance/NeuralMDのより詳細な機能説明は割愛いたしました。
- Advance/NeuralMDについて、商品説明をご希望の方は、別途営業窓口(office@advancesoft.jp)までお問い合わせ下さい。

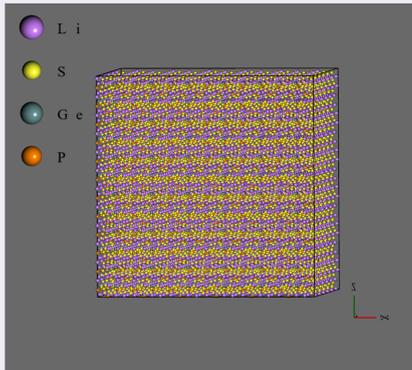
Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

8

NVIDIA H100でのベンチマーク

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。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。原子数は**98,000**個であり、Neural Network力場を適用するには比較的に大きな系になります。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。

【LGPS 98,000原子モデル】



【計算条件】

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
Δ -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

【マシンスペック等】

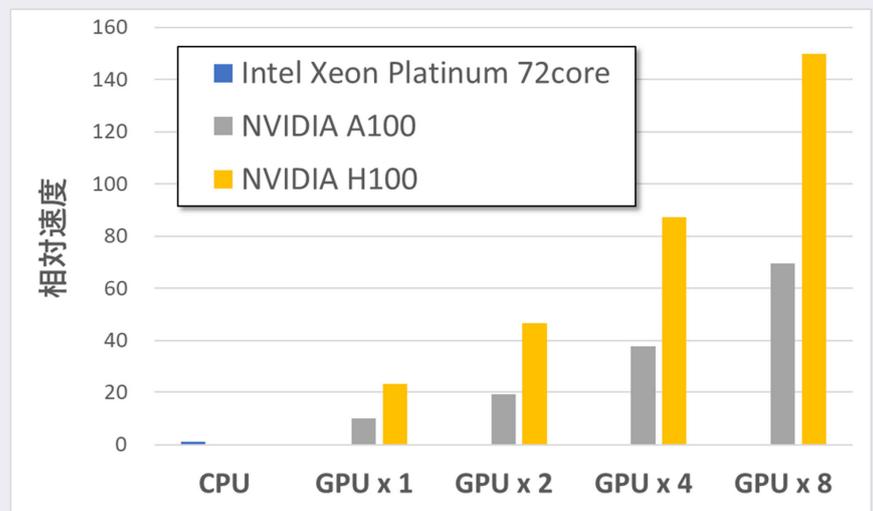
項目	仕様
GPU	NVIDIA H100 x 8
CPU	AMD EPYC 64core x 2
CUDA	12.2
コンパイラ等	GCC OpenMPI OpenBLAS

ハードウェアは、HPCシステムズにご提供頂きました。

9

NVIDIA H100でのベンチマーク

- 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(**98,000原子**)でのベンチマーク
- NVIDIA H100を8枚**使用して計算時間を計測。ハードウェアは、HPCシステムズ(<https://www.hpc.co.jp>)にご提供頂きました。
- A100の2.2~2.4倍の高速化**
- H100 x 8でCPU 1つの約150倍**
- 10万原子系で、約1ns/day**



<http://case.advancesoft.jp/NeuralMD/H100-benchmark/index.html>

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

10

2. マルチGPU対応のSevenNet によるベンチマーク

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

11

SevenNet

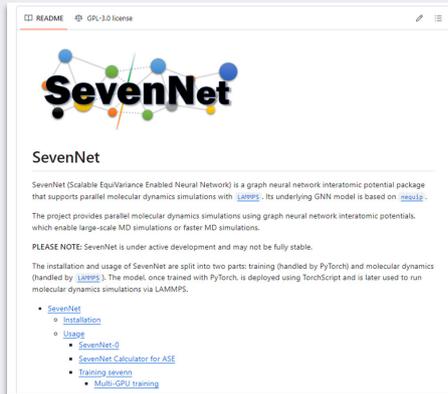
- Seoul National University が開発した汎用GNN力場。
- M3GNetなどと同様に、Materials Projectのデータベースを用いて学習済み。
- Neural Network力場の実装には、GNoMEと同様にNequIPを使用。
- M3GNetよりもやや高精度。テストセットでのMAEは以下の通り。
M3GNet : 35meV/atom, 0.072eV/Å SevenNet : 27meV/atom, 0.067eV/Å
- **LAMMPSにて実装されており、MD実行時のMPI並列が可能**
 - ⇒ **M3GNet, CHGNetなどのGNN力場ではGPU1デバイスのみでのMDであったが、SevenNetでは、マルチGPUでのMDが可能となり10万原子ほどの大規模系も計算可能**
- ただし、グラフ畳み込みのタイミングで、GPUメモリー上のデータに対してMPIプロセス間通信が発生するため、**CUDA-aware MPIの利用が必須**
 - ⇒ NVIDIA A100/H100などのGPUに加えて、
NVLink Bridge、NVSwitchなどのデバイスが必要となる。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

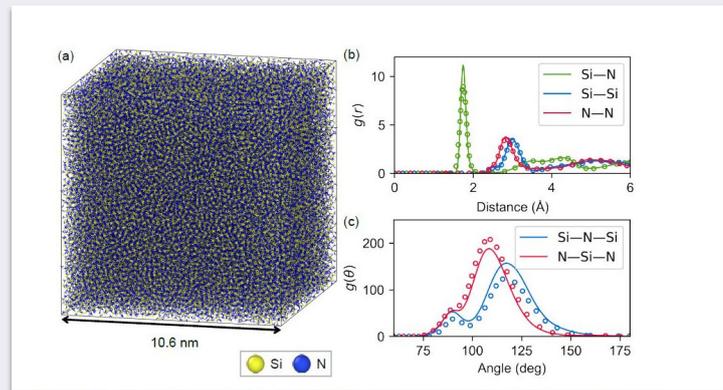
12

SevenNet

- LAMMPSのコードはGitHubにて公開されている(<https://github.com/MDIL-SNU/SevenNet>)。
- 論文でのベンチマークでは、**112,000原子系**のSiNアモルファスに対して**0.1 ns/day**という実用的な時間でのシミュレーションができています。
GPUには NVIDIA A100 x 8 を使用。(<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.ictc.4c00190>)



GitHubのページ

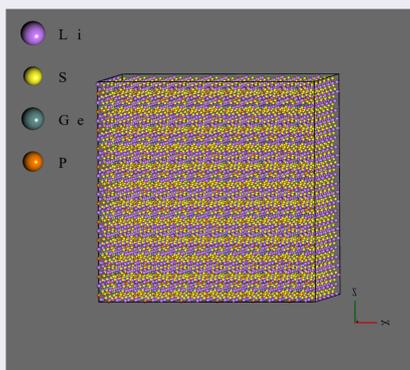


"arXiv:2402.03789v1, 6 Feb 2024"より引用

富士通CaaSクラウドでのベンチマーク

- SevenNetの運用には、**CUDA-aware MPI w/ NVSwitch** が利用可能な計算機環境が必要
- 富士通のCaaSクラウド(<https://jp.fujitsu.com/solutions/cloud/hpc/>)を利用して頂き、SevenNetのベンチマークを実施。GPUにはNVIDIA A100 x 8を使用。
- リチウムイオン伝導体LGPSの**21,600原子**および**98,000原子系**のモデルにて計算

【LGPS 98,000原子モデル】



【計算条件】

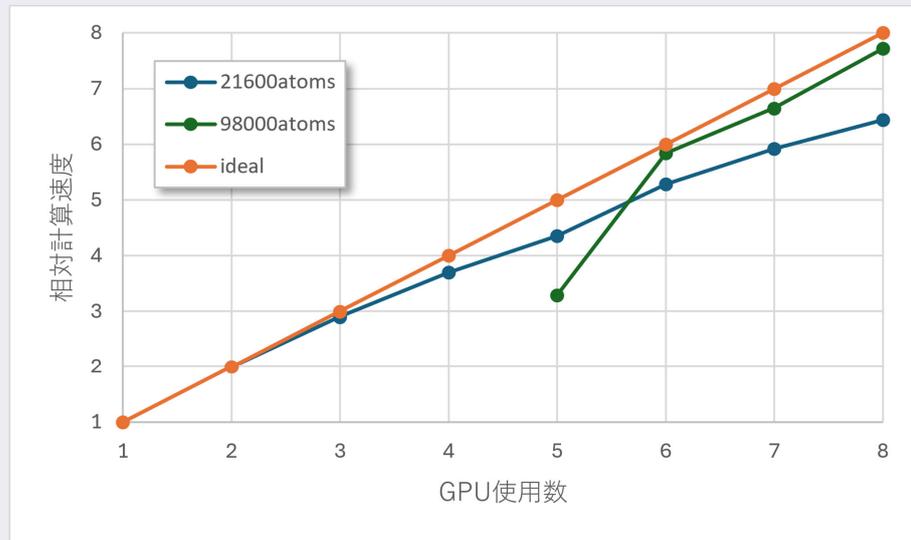
計算条件	設定値
GNNモデル	SevenNet-0
アンサンブル	NVT (T=500K)
時間刻み	0.5fs
MDステップ数	100

【マシンスペック等】

項目	仕様
GPU	NVIDIA A100 (40GB) x 8
CPU	Intel Xeon Gold 6338 (32core) x 2
CUDA	12.2

富士通CaaSクラウドでのベンチマーク

- 大規模系では、GPU数が少ないとデバイスメモリ不足して計算が実施できず。
- 10万原子系の場合には、6 x 40GB = 240GB 以上のデバイスメモリは欲しい。
- 98,000原子系では、並列効率の低下はほぼ見られない。
- **NVIDIA A100 x 8 を使って、10万原子系にて約0.05ns/dayの計算速度**
 - ※ Δt (= 0.5fs) をやや小さく設定していることを考慮すると、文献値とほぼ同じ結果である。
- NeuralMD (0.5ns/day w/ A100x8) より10倍ほど遅いが、力場作成の手間は省ける。
- 大規模系で且つ多様な元素でのシミュレーションが必要な場合に有効。
⇒ 電池・半導体・合金・触媒など



<http://case.advancesoft.jp/NanoLabo/SevenNet-multi-GPU/index.html>

Fujitsu クラウドサービス HPC ご紹介資料

富士通株式会社
2023年12月

第4.1版

- ・本資料の無断複製、転載を禁じます。
- ・本資料は予告なく内容を変更する場合がございます。

© 2023 Fujitsu Limited

目次

01. サービス概要

2. サービスメニュー

3. お問い合わせ先

01 | サービス概要

「Fujitsu クラウドサービス HPC」とは

High Performance Computing (HPC) をより簡単に、
使いたい時にすぐ使えるクラウドサービスとして提供し、お客様のDX推進を支えます

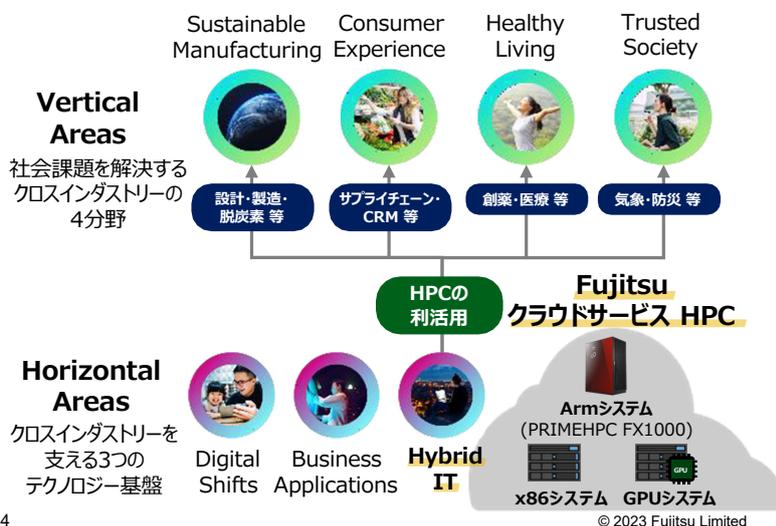
Fujitsu
Uvance

サステナブルな世界の実現を目指し、
社会課題の解決にフォーカスした
ビジネスを推進

当社は、「Fujitsu Uvance」のもとに、社会課題を解決していくため、7つのKey Focus Areas (重点注力分野) を中心に事業を推進していきます。

「Fujitsu クラウドサービス HPC」は、「Fujitsu Uvance」を支えるテクノロジー基盤であるHybrid ITに属するサービスです。当社が長年携わってきたHigh Performance Computing (HPC) の技術をクラウドサービスとして提供し、クロスインダストリーの4分野においてHPCの利活用を拡大することにより、お客様のDX推進を支えます。

「Fujitsu クラウドサービス HPC」では、Armシステムとして「富岳」と高い互換性を有する「PRIMEHPC FX1000」を利用できます。



「Fujitsu クラウドサービス HPC」の特長

FUJITSU

オンデマンドHPCサービスにより、HPC環境をいつでもすぐに利用可能

HPCのジョブ実行に必要な環境はサービス側で全て準備されており、サービスに申し込むだけで、**HPC環境をオンデマンドで利用**できます。

1

HPC利用を加速するプロフェッショナルサポートにより、運用面での技術者確保の課題を解決

大規模HPC運用の知見を有する技術者による**プロフェッショナルサポート**により、HPCの専門知識を持たないお客様であっても、**HPCを最大限に活用**することが可能です。

2

「富岳」との高い互換性により、日本発の最先端の研究開発と社会実装を加速

Armシステムのコンピューティングリソースは、「富岳」と互換を有する**ハードウェア・ソフトウェア**を採用しており、大規模シミュレーションの高速処理を実現できます。

3

5

© 2023 Fujitsu Limited

特長① オンデマンドHPCによる課題解決

FUJITSU



【お客様課題例】

- HPCをオンプレミスで利用するためには、高性能なハードウェアや機器を設置するための設備が必要であり、**長期のリードタイム**が必要になると同時に、**膨大な初期投資**が発生
- 自社のビジネスに必要な**HPCリソースの見積もり**が困難



**オンデマンドHPCサービスの利用により、
HPC導入のハードルを克服**

利用開始のリードタイム短縮

- ✓ コンピュートノード、ログインノード、ジョブスケジューラ、ストレージ、アプリケーションソフトウェア一式が**事前にセットアップ**されているため、HPCの環境を構築する必要がなく、解析に必要なデータを用意するだけで利用可能



初期投資不要で必要なだけ利用

- ✓ クラウドサービスのため、**機器購入、設備の準備が不要**
- ✓ **リソースの見積もりは不要**であり、最小限の利用からスタートし、利用状況に応じて**利用するリソースを拡大**することが可能



6

© 2023 Fujitsu Limited

特長② プロフェッショナルサポートの提供

FUJITSU



【お客様課題例】

- シミュレーションを実行できるHPC環境を整備し、プログラムのチューニングを行える**技術者の確保や育成が困難**
- 自社のビジネス上の課題に対し、**HPCをどのように活用すればよいのかわからない**



大規模HPC運用の知見を持つ技術者がお客様のHPC利活用を全面的にサポート

HPCの導入および性能発揮を支援

- ✓ ソフトウェアやライブラリの導入支援、チューニング・サポートサービスを利用することにより、利用者側で技術者の育成や確保を行うことなく、**HPCの性能を最大限発揮**することが可能



HPCの利活用を支えるサービスの提供

- ✓ お客様のビジネス計画と連動した**HPC活用計画の策定**や、「富岳」の運用知見を活かした**技術的なサポート**※を提供



※ サポートに関連するサービスの利用には別途、契約が必要となります。サポート内容は「プロフェッショナルサポート（関連サービス）」をご覧ください。

7

© 2023 Fujitsu Limited

特長③ 「富岳」テクノロジーによる高速処理

FUJITSU



【お客様課題例】

- 自社のビジネスに必要な**大規模シミュレーションの高速処理**を実現するHPC環境が必要
- 「富岳」で実績のあるアプリケーションを利用する、または将来的に「富岳」の利用を検討するため、「富岳」と**互換性のあるHPC環境**が必要



「富岳」互換を有するArmシステムの利用により、大規模シミュレーションの高速処理を実現

「富岳」と共通の高性能システム基盤

- ✓ 「富岳」と共通のCPU、ジョブスケジューラ、ファイルシステム、コンパイラ、アプリケーション、APIを利用し、「富岳」と同様の**大規模シミュレーションの高速処理**を実現可能



「富岳」と同じ操作性

- ✓ 「富岳」で実績のあるアプリケーションを**容易に利用**することが可能
- ✓ 将来より大規模な解析が必要になった場合や、研究等で「富岳」利用を目指す場合、**同じ操作性**で「富岳」を利用することが可能

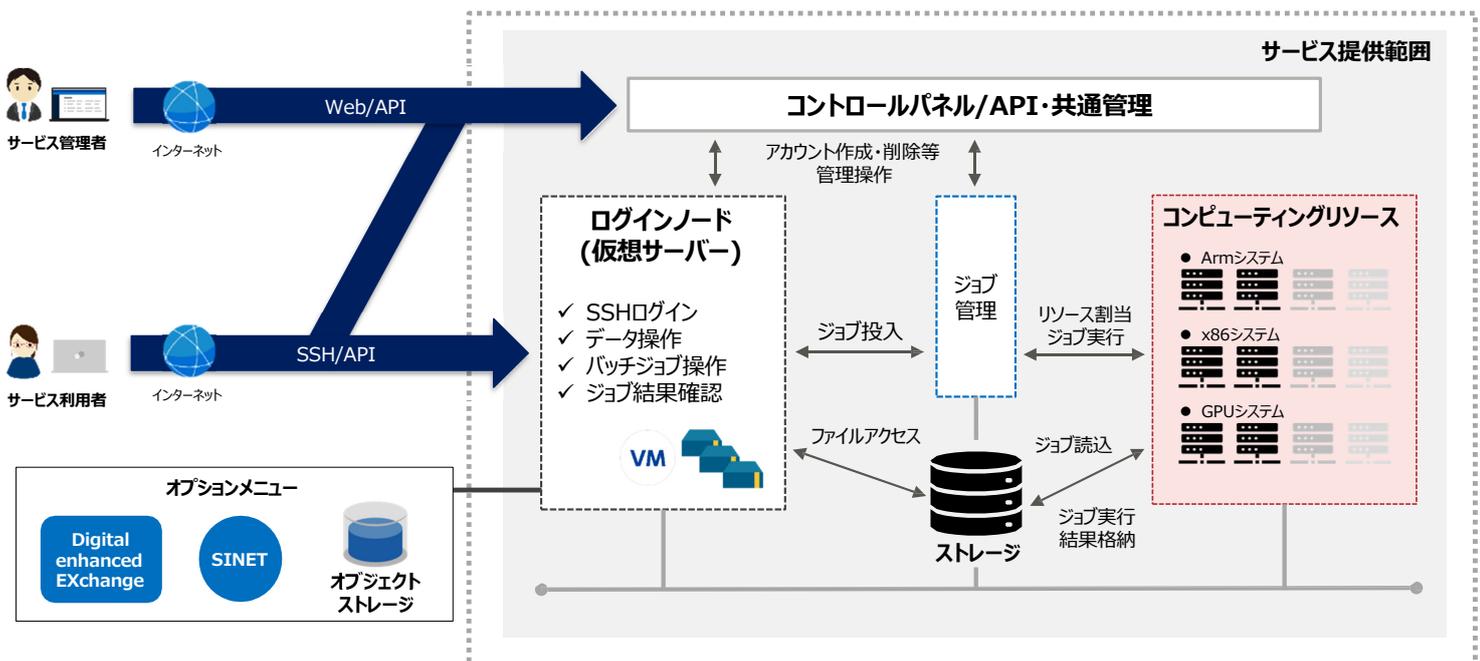


8

© 2023 Fujitsu Limited

02 | サービスメニュー

「Fujitsu クラウドサービス HPC」 利用イメージ



コンピューティングリソースの詳細

各コンピューティングリソースは、以下の性能を有するコンピュータノードにより構成されます。

システム名	CPU種別	CPUコア数 / ノード	CPUベース周波数	CPU最大ターボ周波数	GPU種別	GPU数 / ノード	メモリ量 / ノード	利用単位	ノード間インターコネク
Armシステム	A64FX※ (Armv8.2-A+SVE)	48コア	2.2GHz	—	—	—	HBM2 32GiB	1ノード	Tofu インターコネクD
x86システム	第3世代インテル Xeon スケーラブル プロセッサ	80コア	2.3GHz	3.4GHz	—	—	512GiB	1ノード	InfiniBand 100Gbps
GPUシステム	第3世代インテル Xeon スケーラブル プロセッサ	64コア	2.0GHz	3.2GHz	NVIDIA A100	8	1,024GiB	1GPU	InfiniBand 100Gbps

※ A64FXの詳細につきましては、以下URLをご参照ください。

<https://www.fujitsu.com/jp/products/computing/servers/supercomputer/a64fx/>

※ Armシステムを構成するFX1000のアプリケーション性能情報につきましては、以下URLをご参照ください。

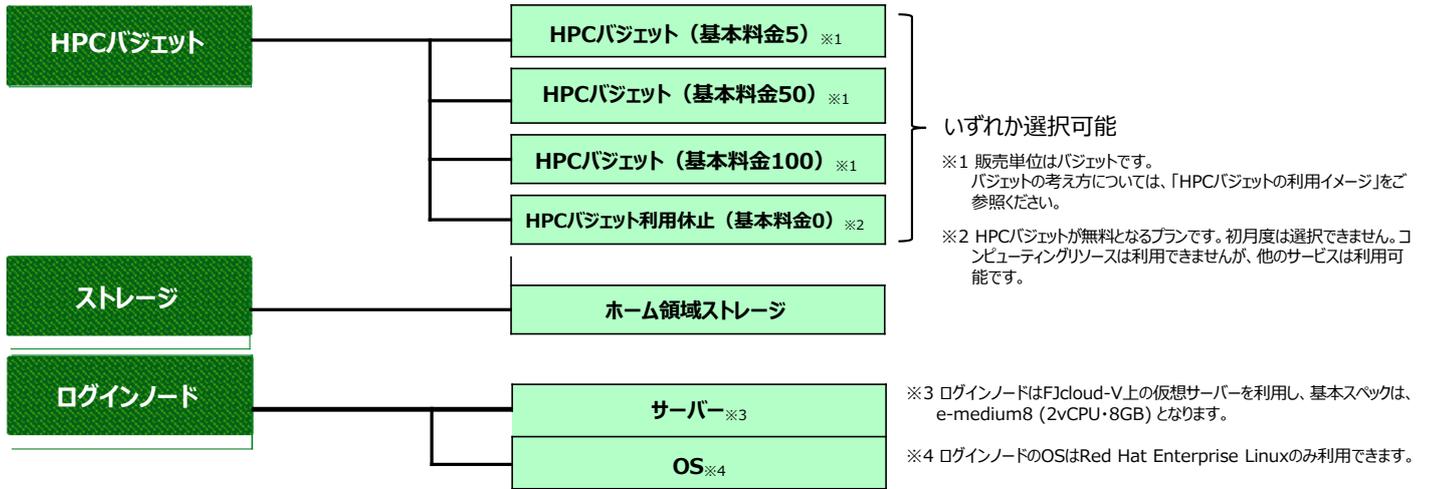
<https://www.fujitsu.com/downloads/JP/jsuper/Applications-for-PRIMEHPC-ja.pdf>

リソースグループの詳細

各コンピューティングリソースは、以下のリソースグループを指定してジョブを投入することにより利用できます。

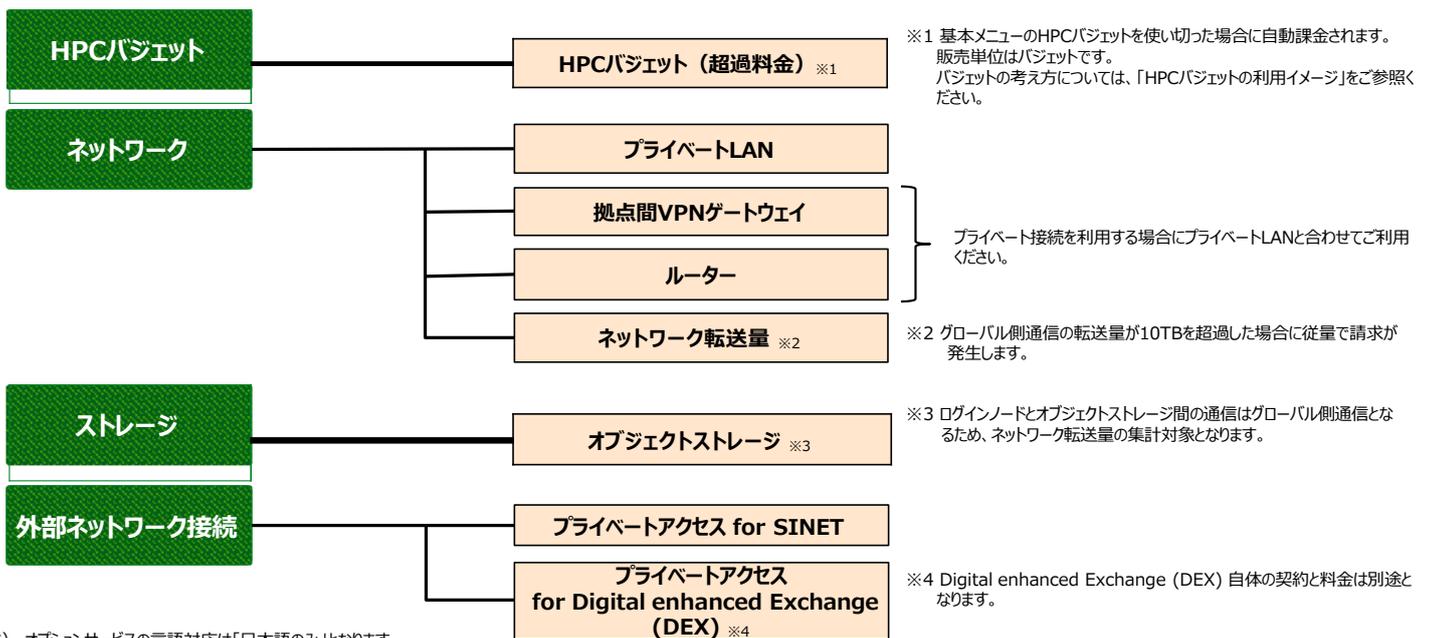
システム名	リソースグループ名	利用可能リソース数	ジョブ実行時間上限
Armシステム	arm-small	1ノード	12時間
	arm-medium	1-12ノード	48時間
	arm-large	13-48ノード	48時間
x86システム	x86-small	1ノード	12時間
	x86-medium	1-4ノード	48時間
	x86-large	5-8ノード	48時間
GPUシステム	gpu-small	1GPU	12時間
	gpu-medium	1-4GPU	48時間
	gpu-large	5-8GPU	48時間

基本サービスメニュー



注) 基本サービスの言語対応は「日本語のみ」となります。

オプションサービスメニュー



注) オプションサービスの言語対応は「日本語のみ」となります。

ヘルプデスクサービス（導入支援窓口）

名称	ヘルプデスクベーシック（導入支援窓口）
問い合わせ受付時間帯	受付時間：9:00～17:45 （土日祝・当社指定の休業日を除く）
問い合わせ対応窓口	Web（メール）
問い合わせ回答時間	平日9:00～17:00（JST）
初期応答目標時間	3営業日※1
利用の前提条件	なし
受け付ける質問の内容	<ul style="list-style-type: none">本サービスの仕様、設定方法および利用方法に関する質問
対応言語	日本語
制限事項	以下に関する問合せは対象外とします <ul style="list-style-type: none">HPC 利用支援（コンパイラ利用方法、ジョブスクリプト作成、ジョブ実行制御、プロファイラ利用方法、契約者が個別に導入するソフトウェアの利用可否判断/インストール/利用方法確認 など）HPC コンサルティング（性能チューニングや教育、ユーザプログラムの代行実行、ユーザプログラムのコーディング技術/翻訳オプション/最適化に関する質問・相談 など）当社サービス環境に関する情報およびログの開示

※1：営業日とは平日9時～17時を指します。（祝日を除く）

ヘルプデスクサービス（トラブル窓口）

名称	ヘルプデスクベーシック（トラブル窓口）
問い合わせ受付時間帯	24時間365日
問い合わせ対応窓口	Web（メール）
問い合わせ回答時間	平日9:00～17:00（JST）
初期応答目標時間	3営業日※1
利用の前提条件	なし
受け付ける質問の内容	<ul style="list-style-type: none">本サービスが正常に動作しない場合における原因調査・回避措置に関する質問・相談お客様環境において情報セキュリティに関する問題が発生した場合に、本サービスの情報セキュリティ防護措置の維持に影響を与えない範囲の原因調査のための質問・相談
対応言語	日本語
制限事項	以下に関する問合せは対象外とします <ul style="list-style-type: none">HPC 利用支援（コンパイラ利用方法、ジョブスクリプト作成、ジョブ実行制御、プロファイラ利用方法、契約者が個別に導入するソフトウェアの利用可否判断/インストール/利用方法確認 など）HPC コンサルティング（性能チューニングや教育、ユーザプログラムの代行実行、ユーザプログラムのコーディング技術/翻訳オプション/最適化に関する質問・相談 など）当社サービス環境に関する情報およびログの開示

※1：営業日とは平日9時～17時を指します。（祝日を除く）

Fujitsu クラウドサービス HPC トライアル



名称	Fujitsu クラウドサービス HPC トライアル
利用料金	無償※1
利用期間	本トライアルの利用開始日から翌月末日まで
申込方法	トライアル申込書のご提出
有償切替による継続利用方法	トライアル終了日 5営業日前までの有償申込書のご提出
対応言語	日本語
HPCバジェット	利用開始月と翌月の各月でHPCバジェット（基本料金5）のみ利用可能 HPCバジェット（超過料金）は利用不可
サービスの利用制限	<ul style="list-style-type: none"> ストレージホーム領域は、「1TB」のみ利用可能 ログインノードのサーバーは、「e-medium8」のみ利用可能 ログインノードのOSは、「Red Hat Enterprise Linux(サブスクリプション付き)」のみ利用可能 ログインノードのネットワークはグローバル接続のみ利用可能 ヘルプデスクサービス、SLAは対象外 ジョブ投入は、有償申込のお客様を優先させていただく場合があります
オプションサービスの利用制限	HPCバジェット（超過料金）、オブジェクトストレージ、ネットワーク転送量、プライベートアクセス for SINET、プライベートアクセスfor Digital enhanced Exchange（DEX）は対象外

※1 アプリケーション利用時にサービス提供側で環境設定が必要な場合、プロフェッショナルサポート（有償）が必要な場合があります。

サービスメニュー料金（基本サービス）



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
HPCバジェット	HPCバジェット (基本料金5)	契約者はバジェットを購入し、全利用者で共有される下記コンピューティングリソースを選択して利用 ・ Armシステム ・ x86システム ・ GPUシステム	バジェット単価 5万円	月額	5万円分 のHPCバジェットを利用可能 コンピューティングリソースの利用量に応じて消費される	<ul style="list-style-type: none"> 購入したバジェットは、使い切らなくとも購入した分の支払いが月末に発生 バジェットを使い切った場合は、「HPCバジェット（超過料金）」が自動で追加 バジェットは翌月自動更新 バジェット有効期限は毎月未まで 障害により異常終了したジョブは課金対象外（ノード予約時を除く）
			コンピューティングリソース単価 ・ Armシステム 330円 ／ノード・時間※1 ・ x86システム 490円 ／ノード・時間※1 ・ GPUシステム 420円 ／GPU・時間※1			
			ノード予約単価 ・ Armシステム 9,500円 ／ノード・日※2 ・ x86システム 14,100円 ／ノード・日 ・ GPUシステム 96,700円 ／ノード・日			

※1 1時間未満のご利用は1時間に切り上げ。

※2 Armシステムのノード予約は12ノード単位。

サービスメニュー料金 (基本サービス)



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
HPCバジェット	HPCバジェット (基本料金50)	契約者はバジェットを購入し、全利用者で共有される下記コンピューティングリソースを選択して利用 ・ Armシステム ・ x86システム ・ GPUシステム	バジェット単価 50万円	月額	55万円分のHPCバジェットを利用可能 コンピューティングリソースの利用量に応じて消費される	<ul style="list-style-type: none"> 購入したバジェットは、使い切らなくとも購入した分の支払いが月末に発生 バジェットを使い切った場合は、「HPCバジェット (超過料金)」が自動で追加 バジェットは翌月自動更新 バジェット有効期限は毎月末まで 障害により異常終了したジョブは課金対象外 (ノード予約時を除く)
	HPCバジェット (基本料金100)		バジェット単価 100万円		110万円分のHPCバジェットを利用可能 コンピューティングリソースの利用量に応じて消費される	
	HPCバジェット 利用休止 (基本料金0)	コンピューティングリソースを利用しない期間に選択可能なプラン	バジェット単価 0円		コンピューティングリソースは利用不可 ストレージおよびログインノードにはアクセス可能	

サービスメニュー料金 (基本サービス)



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
ストレージ	ホーム領域 ストレージ	利用者のホーム領域として利用可能なストレージ	9,400円 / TB・月	月額	初期値1TB、増設単位1TB、最大100TBまで増量可 (100TBより大きい容量は個別相談)	<ul style="list-style-type: none"> 月内で確保した最大のストレージ領域分に対して課金

サービスメニュー料金（基本サービス）



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考	
ログイン ノード	サーバー	e-medium8	「Fujitsu クラウドサービス HPC」環境を利用するために利用者がログインするサーバー	月額：21,000円/台数・月 従量起動時：37円/台数・時	月額 従量	2vCPU・8GB	<ul style="list-style-type: none"> ログインノードは1台のみ利用可能 ログインノード利用開始後、サービス解約まで停止は不可 従量メニューは、利用期間が1か月に満たない場合に推奨 月額と従量の切り替えはお客様ご自身でコントロールパネルより実施 root権限での操作は不可 セキュリティパッチはシステム管理者にて適用
		e-medium16				2vCPU・16GB	
		e-medium24				2vCPU・24GB	
	OS	Red Hat Enterprise Linux (サブスクリプション付き)	4コア以下用ライセンス (6vCPU未満のサーバー)	月額：6,700円/台数・月 従量：12円/台数・時	—	OSはRHELのみ利用可能	

サービスメニュー料金（オプションサービス）



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
HPCバジェット	HPCバジェット (超過料金)	基本メニューのバジェットを超過した際に自動追加	バジェット単価 10,000円	月額	仕様・コンピューティングリソース単価は基本サービスメニューの「HPCバジェット（基本料金5）」と同じ	<ul style="list-style-type: none"> 1万円単位でバジェットが自動購入され、使い切らなくとも購入した分の支払いが月末に発生 バジェットを使い切った場合は自動で追加 バジェット有効期限は毎月末まで 障害により異常終了したジョブは課金対象外（ノード予約時を除く） HPCバジェット (超過料金) 抑止機能が有効な場合は購入されない
ネットワーク	プライベートLAN	ログインノードでプライベート接続を利用する場合に利用	月額：5,000円/プライベートLAN・月 従量：9円/プライベートLAN・時	月額 従量	ログインノードをプライベートLANに接続	<ul style="list-style-type: none"> 従量メニューは、利用期間が1か月に満たない場合に推奨 月額と従量の切り替えはお客様ご自身でコントロールパネルより実施

サービスメニュー料金 (オプションサービス)



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
ネットワーク	拠点間VPN ゲートウェイ	「Fujitsu クラウドサービス HPC」基盤へのプライベートな接続を提供	月額： 12,000円 / 台数・月 従量： 20円 / 台数・時	月額 従量	接続可能なVPNコネクション数： 1拠点 / 拠点間VPNゲートウェイ ルート数： 10ルート / ルートテーブル	<ul style="list-style-type: none"> プライベートLANと組み合わせて利用 従量メニューは、利用期間が1か月に満たない場合に推奨 月額と従量の切り替えはお客様ご自身でコントロールパネルより実施
			月額： 19,000円 / 台数・月 従量： 32円 / 台数・時		接続可能なVPNコネクション数： 10拠点 / 拠点間VPNゲートウェイ ルート数： 30ルート / ルートテーブル	
			月額： 33,000円 / 台数・月 従量： 55円 / 台数・時		接続可能なVPNコネクション数： 50拠点 / 拠点間VPNゲートウェイ ルート数： 80ルート / ルートテーブル	
	ルーター	プライベートLANを利用する場合に「Fujitsu クラウドサービス HPC」基盤へのインターネット経由での接続を提供	月額： 12,000円 / 台数・月 従量： 20円 / 台数・時		ルート数： 10ルート / ルートテーブル	
			月額： 19,000円 / 台数・月 従量： 32円 / 台数・時		ルート数： 30ルート / ルートテーブル	
			月額： 33,000円 / 台数・月 従量： 55円 / 台数・時		ルート数： 80ルート / ルートテーブル	

サービスメニュー料金 (オプションサービス)



価格はすべて税抜き表示です

サービス名		サービス概要	単価	支払	仕様	備考
ネットワーク	ネットワーク 転送量	グローバル側通信において、送受信の転送量が10TBを超過した場合に適用	15円 / GB	従量	-	<ul style="list-style-type: none"> ログインノードとインターネット間の通信量 転送量は10TBまで無償 転送量が10TBを超えると自動課金 プライベート側通信は転送量にかかわらず無料
ストレージ	オブジェクト ストレージ	バックアップ領域等として利用	0.0025円 / GB・時	従量	インターフェイスとしてREST API (S3互換) を提供	<ul style="list-style-type: none"> ログインノードとオブジェクトストレージ間の通信はグローバル側通信となるため、ネットワーク転送量の集計対象

サービスメニュー料金（オプションサービス）



価格はすべて税抜き表示です

サービス名	サービス概要	単価	支払	仕様	備考
外部ネットワーク 接続	プライベートアクセス for SINET	学術情報ネットワーク (SINET) 接続 10,000円 /プライベートLAN・月	月額	IN/OUT : 1Gbps ベストエフォート 接続レイヤー : L2	
	プライベートアクセス for Digital enhanced Exchange (DEX)	様々な環境につながる DEXへ接続 10,000円 /プライベートLAN・月		IN/OUT : 1Gbps ベストエフォート 接続レイヤー : L2	<ul style="list-style-type: none"> Digital enhanced Exchange (DEX) 自体の契約と料金は別途 DEXの申込が別途必要

プロフェッショナルサポート（関連サービス）



プロフェッショナルサポートを利用するには、別途、契約が必要となります。料金は個別見積となります。

HPCセントラルサポート スタートアップサービス

メニュー	サービス概要
プロフェッショナル	HPCシステム構築のプロフェッショナルスキルを有するスタッフが、お客様の固有要件に応じた作業を行うサービスです。お客様が「Fujitsu クラウドサービス HPC」上でISV等のアプリケーションを利用したい場合、アプリケーションインストール等の環境整備を実施します。

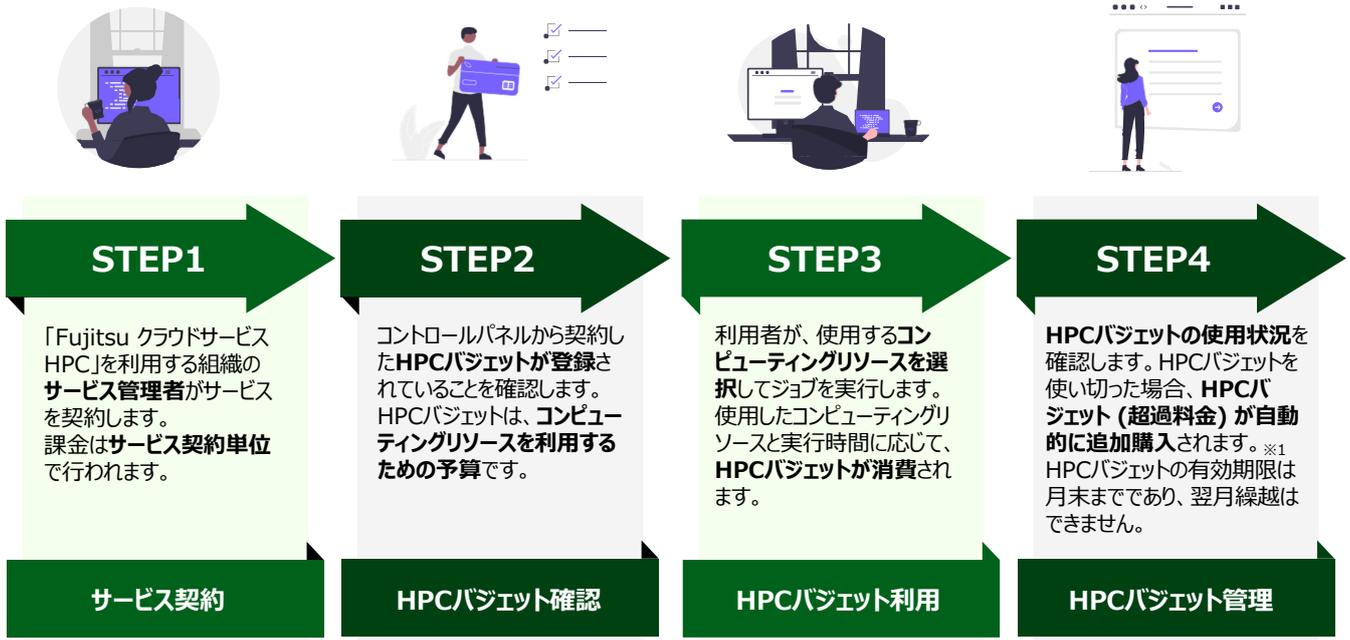
HPCセントラルサポート マネージドサービス

メニュー	サービス概要
プロフェッショナル 運用支援	「Fujitsu クラウドサービス HPC」の高度な利用方法に関するサポートサービスです。プロフェッショナルスキルを有するスタッフが、ヘルプデスクベーシック対応範囲外のQ&A対応および課題解決支援を実施します。

HPCセントラルサポート チューニングサービス

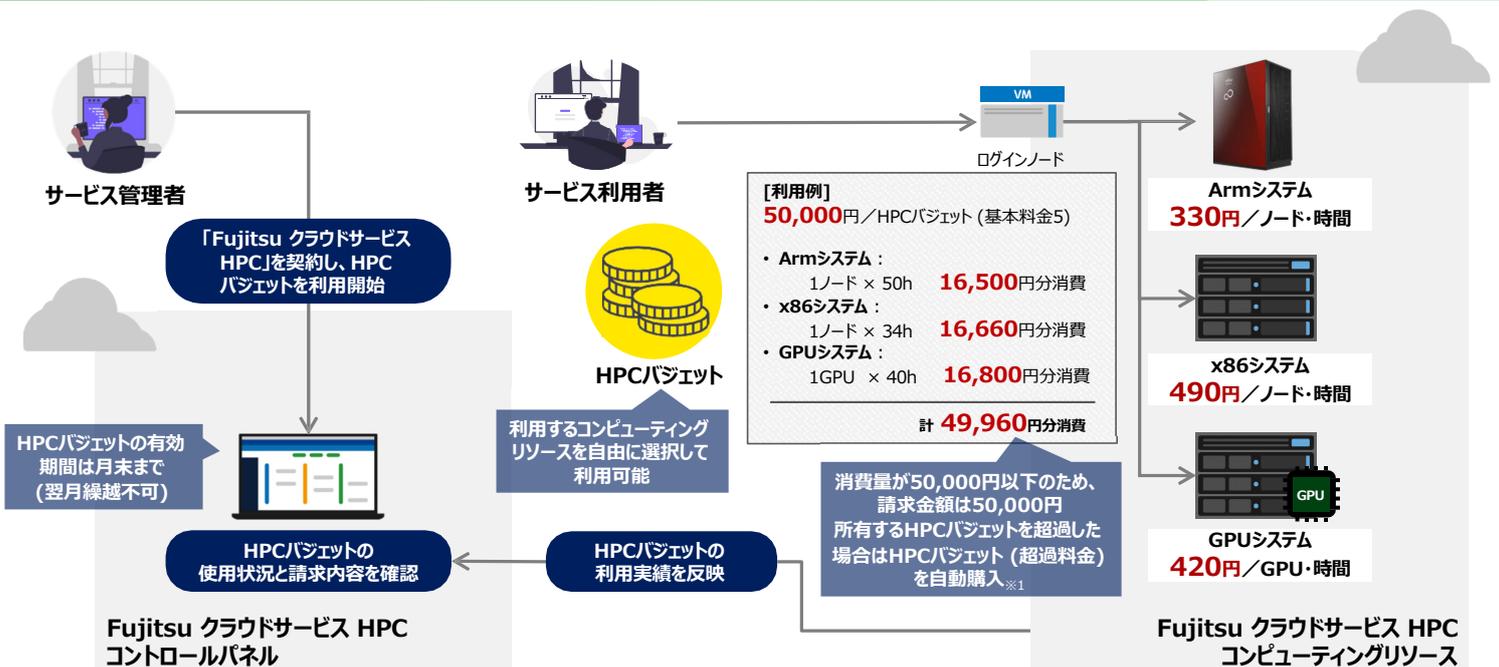
商品	サービス概要
アプリ分析サービス	分析ツールを使用し、ユーザプログラムの実行状況を分析し、コストの高い処理を対象に高速化の指針を考察します。ユーザプログラム1種類かつ1種類のデータを対象とします。
チューニングサービス	ユーザプログラムのソースコードを改変して性能向上するための作業を支援します。「アプリ分析サービス」を実施済みであることが前提であり、本サービス単体では利用できません。
チューニング教育サービス	ユーザプログラムの性能向上に必要なプログラミング技術を解説します。e-learning形式で実施します。

HPCバジェットの利用ステップ



*1 「HPCバジェット(超過料金)抑止」機能が無効に設定されている場合

HPCバジェットの利用イメージ

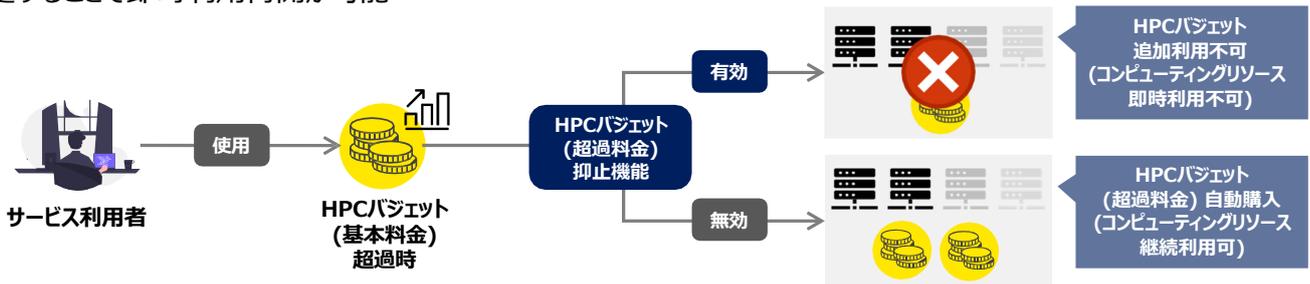


*1 「HPCバジェット(超過料金)抑止」機能が無効に設定されている場合

HPCバジェット (超過料金) 抑止機能

HPCバジェットの利用を基本料金プラン内に制限したい場合、「HPCバジェット (超過料金) 抑止機能」を利用することにより、HPCバジェット (超過料金) の自動購入を抑止できます。

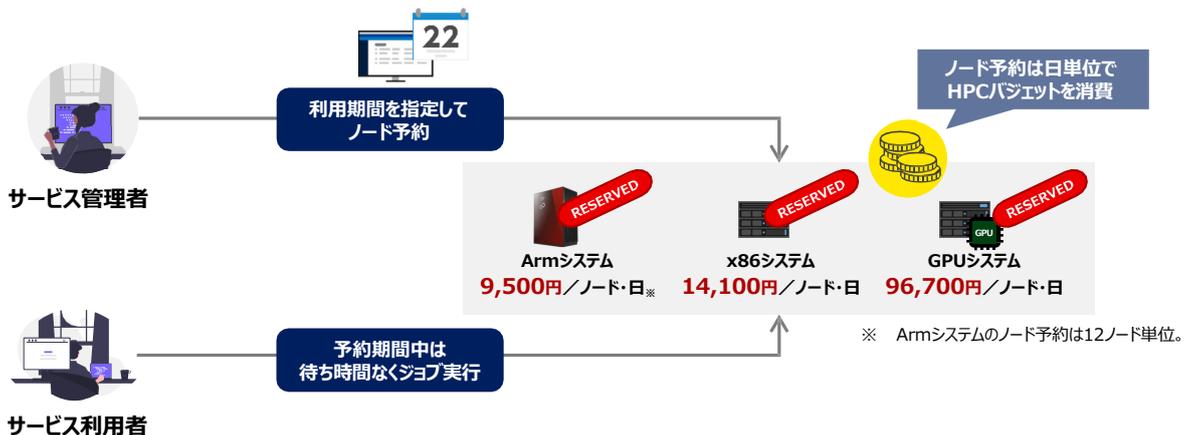
- サービス管理者がコントロールパネルより、「HPCバジェット (超過料金) 抑止機能」の有効/無効を任意のタイミングで設定可能
- 本機能が有効の状態ではHPCバジェットの利用が基本料金プランを超過した場合、実行中および実行待ちのジョブはキャンセルされ、以降のジョブ実行は不可
- HPCバジェット (超過料金) が購入された状態で本機能を有効にした場合、HPCバジェット (超過料金) は追加購入されず、実行中のジョブはキャンセルされ、以降のジョブ実行は不可
- 本機能によりHPCバジェット (超過料金) の自動購入が抑止され、ジョブ実行ができない場合、本機能を無効に設定することで即時利用再開が可能



ノード予約サービス NEW

ノード予約サービスを利用することにより、予約期間中は待ち時間なくジョブを実行することができます。特定の期間において、確実にジョブを実行したい場合にご利用ください。

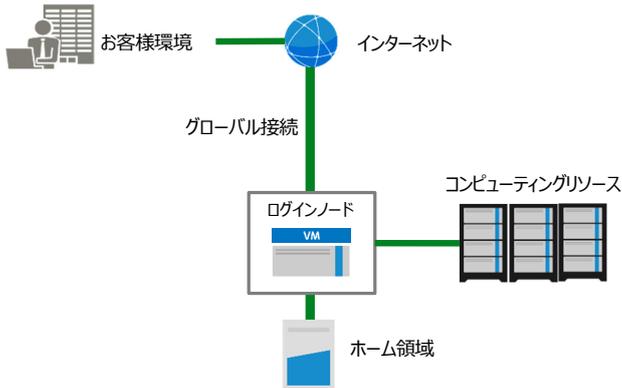
- サービス管理者がコントロールパネルより、各コンピューティングリソースに対してノード予約の設定が可能
- 予約期間において予約可能なノード数の上限に到達している場合は予約不可
- ノード予約は日単位でHPCバジェットに対して課金される
- ノード予約は予約登録日の4日後から登録可能



構成例・見積サンプル

検証などの用途のため、必要最小限の構成で「Fujitsu クラウドサービス HPC」を利用

- お客様環境からインターネット経由でログインノードへアクセス（アカウント上限数は100）
- コンピューティングリソースはHPCバジェット（基本料金5）の範囲で利用
- ホーム領域のストレージを1TB利用
- ログインノード・OSは月額利用



月額合計
87,100円

月額料金例

サービスメニュー		利用量	料金 (円)
HPCバジェット (基本料金5)	下記コンピューティングリソースを利用可能 ・ Armシステム ・ x86システム ・ GPUシステム	基本バジェット	50,000
ストレージ	ホーム領域	1TB	9,400
ログインノード	サーバー (e-medium8)	1台	21,000
	OS (Red Hat Enterprise Linux・4コア以下)	1台	6,700
ヘルプデスクサービス	ベーシック	-	無償
計			87,100

価格はすべて税抜き表示です

商用アプリケーション (2023年7月)

FujitsuクラウドサービスHPC上で商用アプリケーションの動作が可能。
ベンダと協働で対象アプリを順次拡大中。下記以外のアプリについてもご相談ください。

- ◎ = 動作検証済
- = 動作検証予定
- = 利用者によるインストール・動作確認
- x86 Arm = 対象システム
- ★ = 富士通よりライセンス購入可能

<p>構造</p> <p>Altair OptiStruct™</p> <p>Altair Radioss™</p> <p>Ansys LS-DYNA</p> <p>Ansys Mechanical</p> <p>Marc</p> <p>MSC Nastran</p>	<p>流体</p> <p>Altair AcuSolve™</p> <p>Ansys CFX</p> <p>Ansys Fluent</p> <p>Ansys Icepak</p> <p>COLMINA CAE 粒子法鋳造解析 (by 富士通株式会社)</p> <p>CONVERGE CFD SOFTWARE (by Convergent Science)</p>	<p>電磁界</p> <p>Altair FEKO™</p> <p>Ansys Maxwell</p> <p>COLMINA CAE 磁界シミュレーター (by 富士通株式会社)</p> <p>Poynting (by 富士通株式会社)</p> <p>VASP (by VASP Software GmbH)</p>
<p>機構</p> <p>Adams</p>	<p>Cradle CFD scFLOW</p> <p>Cradle CFD STREAM</p>	<p>化学</p>
<p>音響</p> <p>Actran</p>	<p>Simcenter™ STAR-CCM+™ (by Siemens Digital Industries Software)</p>	

※商用アプリケーションのライセンスは、利用者自身で各ベンダー等から購入し、ライセンス規約に沿って利用してください。（一部のアプリは富士通から購入できます）
※商用アプリケーションのインストールについては、富士通の代行サービスをご利用いただけます。ただし、VASPは、ライセンス規約により代行できないため、利用者自身でインストールする必要があります。
※スライド内の全てのアプリケーション名は、各ベンダーの商標または登録商標です。

利用可能なソフトウェア一覧

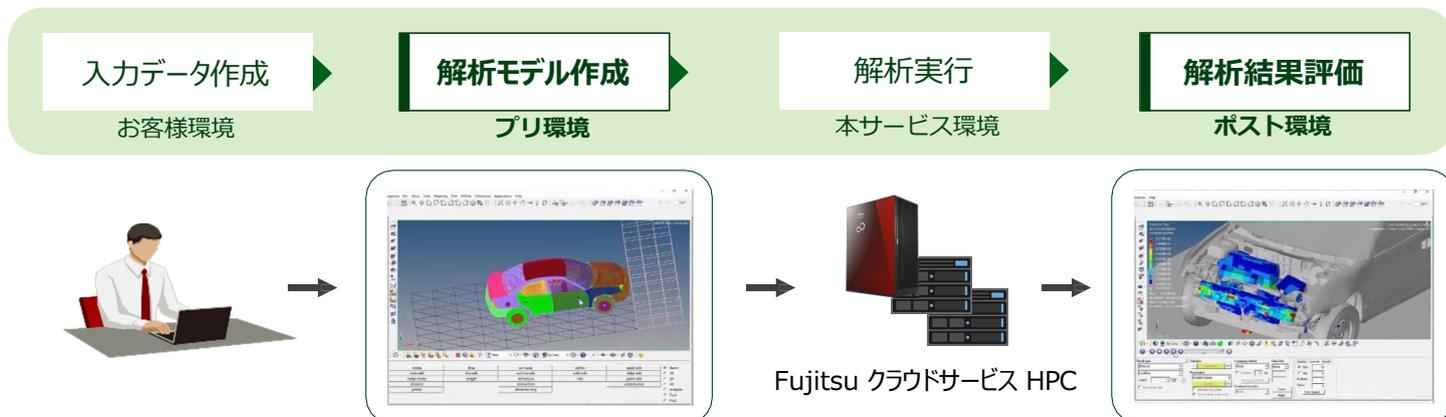
本サービスにおいて標準で利用可能なソフトウェアは以下の通りです。
また、利用者はホーム領域ストレージに任意のソフトウェアをインストールしてご利用できます。

ソフトウェア名	利用可能なシステム	ソフトウェア種別
FUJITSU Software Technical Computing Suite Development Studio	Armシステム	開発環境
oneAPI	x86システム GPUシステム	開発環境
NVIDIA HPC SDK	x86システム GPUシステム	開発環境

ソフトウェア名	利用可能なシステム	ソフトウェア種別
GROMACS	Armシステム x86システム GPUシステム	分子動力学計算用アプリケーション
OpenFOAM	Armシステム x86システム	連続流体解析用アプリケーション
Quantum Espresso	Armシステム x86システム GPUシステム	第一原理計算用アプリケーション
LAMMPS	Armシステム x86システム GPUシステム	分子動力学計算用アプリケーション
FrontISTR	Armシステム x86システム	構造解析用アプリケーション

ご参考：プリポスト環境について

本サービスでは、お客様環境にてプリポスト処理を実施いただく必要があります。
プリポスト環境をご要望の場合は、本サービスと連携可能なサービスを別途ご提案可能です。



詳細につきましては、以下関連サービス/ソフトウェアサイトをご参照ください。
<https://doc.cloud.global.fujitsu.com/lib/common/jp/hpc-related-services-software/>

本サービスをより便利にお使いいただくための関連サービス/ソフトウェアにつきましては、以下URLをご参照ください。

<https://doc.cloud.global.fujitsu.com/lib/common/jp/hpc-related-services-software/>

関連サービス/ソフトウェアのカテゴリ

- リモートアクセスサービス
- エンジニアリングサービス
- 統合プラットフォーム
- 高速シミュレーション

03 | お問い合わせ先

- 「Fujitsu クラウドサービス HPC」に関する最新情報につきましては、以下URLをご参照ください。
<https://jp.fujitsu.com/solutions/cloud/hpc/>

Fujitsu クラウドサービス HPC お問い合わせ窓口



TEL : **0120-933-200**

富士通コンタクトライン (総合窓口)

受付時間 **9:00~17:30**

(土・日・祝日・当社指定の休業日を除く)



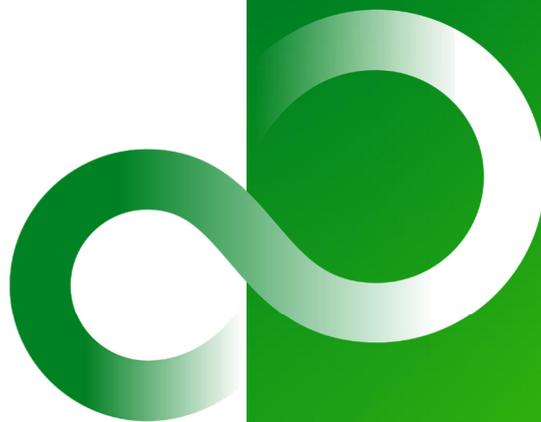
Web :

<https://jp.fujitsu.com/solutions/cloud/hpc/>

※ トライアルをご希望の方は、弊社担当営業にお問い合わせください。

※ 弊社担当営業からサービス利用申込みを希望されるお客様は、直接担当者へお問い合わせください。

Thank you





NanoLabo Cloud Desktop

のご紹介

アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD製品紹介セミナー
[15:15 ~ 15:45]

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

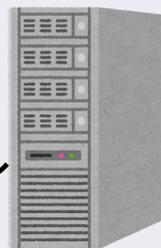
1

何がクラウドになるのか？

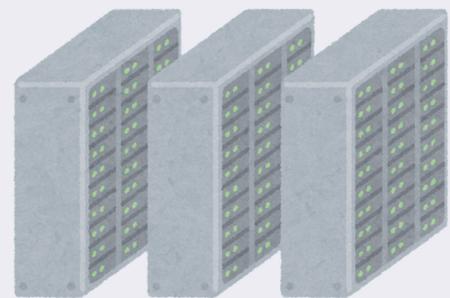
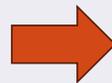
従来のNanoLaboの使い方



ワークステーション



ジョブ投入



社内クラスター・学内サーバー・
外部スパコン等

NanoLaboを使うデスクトップ環境 と 計算を行う計算資源

NanoLabo Cloud Desktopでクラウド化！

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

サービスのイメージ



3

クラウド：Microsoft Azureについて

アジュール

- Amazon(AWS)、Google Cloudと並ぶ主要なクラウドベンダー
- マイクロソフトが管理する世界各地のデータセンターのコンピュータ資源を仮想化してサービスとして提供
 - コンピューティング、ストレージ、データベース、ネットワーク、分析、AI+機械学習、IoT、……



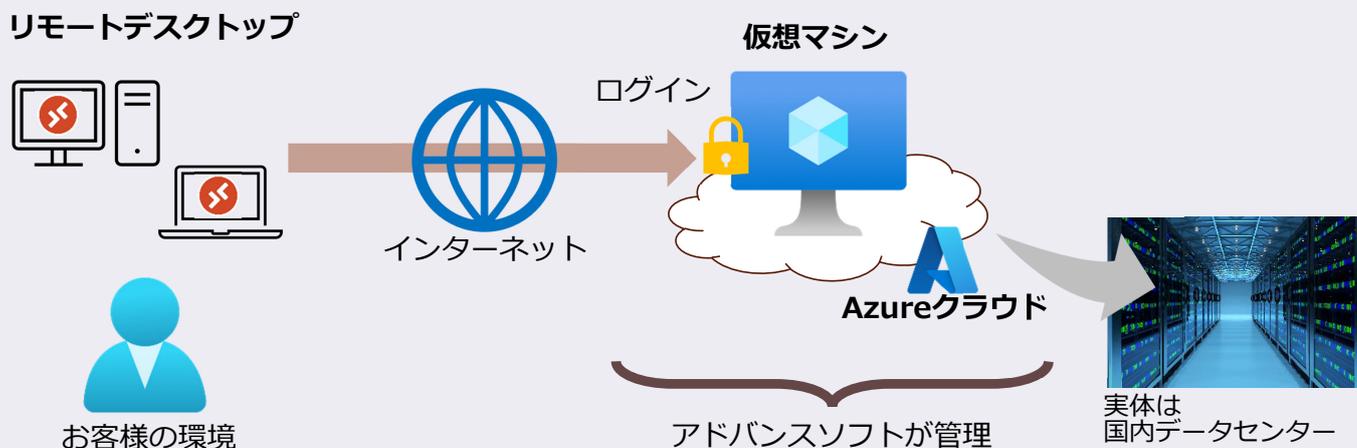
仮想化



Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

システムの概略



Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

5

仮想マシンの環境

- Windowsデスクトップ ソフトの持ち込みインストールもOK
- NanoLaboインストール済み
- 環境構築が必要な機能もセットアップ済み

➡ すぐに使える！

第一原理計算



古典分子動力学計算



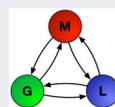
ニューラルネットワーク力場



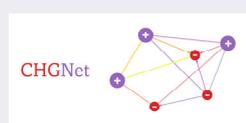
グラフニューラルネットワーク力場



Open Catalyst Project

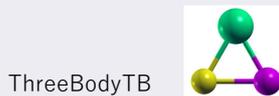


M3GNet/MatGL



CHGNet

汎用タイトバインディング法



ThreeBodyTB

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

6

安心・安全

- シェアが大きく利用実績があるAzureクラウドを使用
- パッケージ化して提供されているAzure Virtual Desktopサービスを使用
- 利用料金は定額、使いすぎの心配なし
- 国内リージョン使用、データを国外に置くリスクなし

- データを物理的に手元に置かずに解析
- ストレージ廃棄時の漏洩リスク等もなし



マイクロソフト主催イベントde:code2016の講演スライドより <https://www.slideshare.net/decode2016/spl002>

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

7

スペック・料金システム

- サブスクリプション型・ワークステーションレベルの計算リソース

	CPUコア数	メモリー	ストレージ	利用料金
Lite	8	32GB	200GB	45万円/年～
Regular	16	64GB	400GB	90万円/年～
カスタマイズ	ご指定のスペックでお見積を承ります。			

- Azureクラウドの利用料金・Windowsのライセンス料金が含まれており、お客様がマイクロソフトに追加で支払う料金はありません。
- Advance/NanoLaboのライセンス料金は含まれません。
- 利用期間は1年単位です。
- 利用期間の途中でスペックを変更することはできません。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

8

特長のまとめ

- 手間いらず
 - 物理的なサーバーの調達・設置が不要
 - 動作音・設置場所の用意等の問題もなし
 - NanoLaboの計算機能がセットアップ済み
 - 運用コスト・メンテナンスフリー
- 利便性
 - 使い慣れたWindowsデスクトップ環境
 - 通常のパソコン等から利用可能
 - ソフト持ち込みOK
- 明朗な料金システム
 - サブスクリプション型・定額で使いすぎの心配もなし
 - 他社とのライセンス契約等が不要
- 安心安全
 - 国内リージョンのデータセンターを使用
 - ストレージ廃棄時の漏洩リスク等もなし

ワークステーション・SaaSとの比較

Software as a Service
材料解析に特化したサービスを想定

	ワークステーション	NanoLabo Cloud Desktop	SaaS
物理的な筐体	調達・設置が必要	不要	不要
セットアップ作業	ソフトインストールが必要	不要	不要
費用/利用料金	運用・メンテナンスの費用	定額の利用料金	従量課金など
インターフェース	デスクトップ環境	デスクトップ環境	ブラウザ (独自UI)

使用デモンストレーション



- 使い方は2通り
 - ① 「リモート デスクトップ クライアント」を使う
 - Windows/macOS/iOS/iPadOS/Android/ChromeOS
 - ② ウェブブラウザを使う
 - インストール不要
- このスライドを映しているノートパソコンから実際に使ってみます。

AIを活用した製品開発



[Autopilot機能のご紹介]

アドバンスソフト株式会社
NanoLabo/NeuralMD製品紹介セミナー
[15:45~16:15]

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

1

AIを活用した製品開発



- 製品の使い方に関して回答するChatbot
⇒ Ver.2.9.2で搭載
- Autopilotによる材料モデルの自動生成
⇒ Ver.3.0で搭載予定、この機能を紹介します。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

Autopilot (材料モデル生成AI)

- ユーザーが作りたい原子構造モデルを言葉で入力するだけで、自動的にモデルが生成されます。**Advance/NanoLabo**のモデリング機能をAIで自動化したものです。
- 世界初の実装で、競合他社の製品には類似機能は御座いません。
- ファインチューニングされたGPT3.5-turboをベースに実装しています。
⇒ ChatGPTなどの社内利用が禁止されているお客様はご注意ください。
- 音声による入力にも対応しています。
- AIがモデリングの全プロセスを遂行する「**Full-Auto**」モードに加えて、モデリングの途中で適宜ユーザーが細部を設定できる「**Semi-Auto**」モードも利用可能です。
- Jupyter LabやMatlantisへの構造データ転送にも対応しています。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

Autopilot (材料モデル生成AI)

【命令文の例】

1. 命令文「NMC電極の110表面と、1mol/LのLiBF₄のEC:DMC(7:3)溶液の固液界面」

- ⇒ 層状LiCoO₂のスーパーセルを作り、CoをMnとNiに置換して(110)スラブを作った後、EC, DMC, Li⁺, BF₄⁻を指定された割合でパッキングします。
※AIがNMC電極の意味を理解した上でモデリングします。

2. 命令文「Fe/Ni/Cr/Mn = 7/1/1/1の合金」

- ⇒ Feのスーパーセルを作成した後、FeをNiに10.0%置換、FeをCrに11.1%置換、FeをMnに12.5%置換します。
※AIが元素置換率を自動計算してくれます。

3. 命令文「ZrO₂/Rh(111) + 2 x NO@hollow」

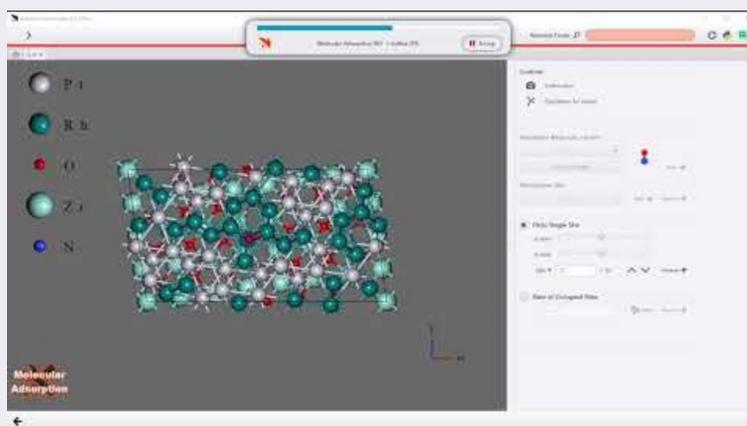
- ⇒ ZrO₂とRh(111)の界面モデルを作成して、その上に一酸化窒素分子をホローサイトに2つ吸着させます。
※AIは化学式を使った曖昧な表現も理解します。

Copyright 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4

Autopilotのデモンストレーション

- Autopilotの実際の動作をお見せします。
- AIの精度については、最終調整前の β 版になります。
- Q&Aにて「**命令文**」を入力して頂ければ、その場でAIにモデルを作らせます。



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/NeuralMD製品紹介セミナー
[16:15~16:30]

Copyright 2024 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
Jupyter Interface for NanoLabo	40万円	120万円	20万円	60万円

※価格は全て税抜です。

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

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 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

2

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。

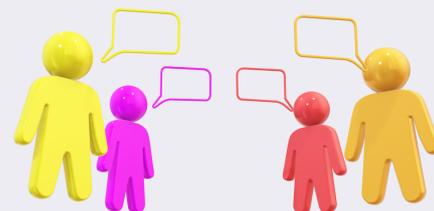


1. 流体・構造・ナノ関連など幅広い分野のソフトウェアを開発し、解析経験がある技術者がお客様のご要望をお伺いいたします。

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 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

3

ご清聴ありがとうございました。

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 2024 AdvanceSoft Corp., All Rights Reserved.

4



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。