

# 計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS



Fujitsu クラウドサービス HPCと連携して、高速かつ簡単に分子シミュレーションを実行可能

## SCIGRESS とは

分子力学法、分子動力学法、半経験的分子軌道法、非経験的分子軌道法、密度汎関数法、第一原理計算を直感的な操作でご利用いただけます。専門家による受託計算も行っており、お客様の新材料、新素材の研究開発を支援します。



## SCIGRESSの特長



安心のロングセラー

富士通が長年開発と販売を続けているソフトですので、安心してご利用いただけます。素材系企業の研究所、大学（研究・教育）、公的研究機関の多くで導入されています。



簡単な操作性

簡単で直感的なGUIで計算化学の専門知識がなくても手軽に利用可能です。日本人研究者のための日本語インターフェースと操作マニュアルが用意されています。



手厚いサポート

お客様がされたいことを富士通の専門家がサポートいたします。メールによる質疑応答サービスの回数は無制限 & Web会議での個別相談も可能です。

### 対応分子系

低分子、高分子、結晶、アモルファス、溶液、界面

### 対応計算法

分子力学法、非経験的分子軌道法、半経験的分子軌道法、密度汎関数法、分子動力学法、第一原理計算

### 適応分野

ポリマー、半導体、電池、触媒、試薬・色素、エネルギー資源、ガラス、液晶

### 対応アプリ※1

富士通ソフト

MO-G, MO-S, MD-ME, Mechanics, ZINDO, DGauss

商用ソフト

Gaussian, CONFLEX

オープンソース

GAMESS, LAMMPS(※2), PHASE/0, Quantum ESPRESSO(※2), MOPAC

※1対応アプリの製品名は、各社の商標または登録商標です。

※2Fujitsu クラウドサービス HPCにプリインストールされています。

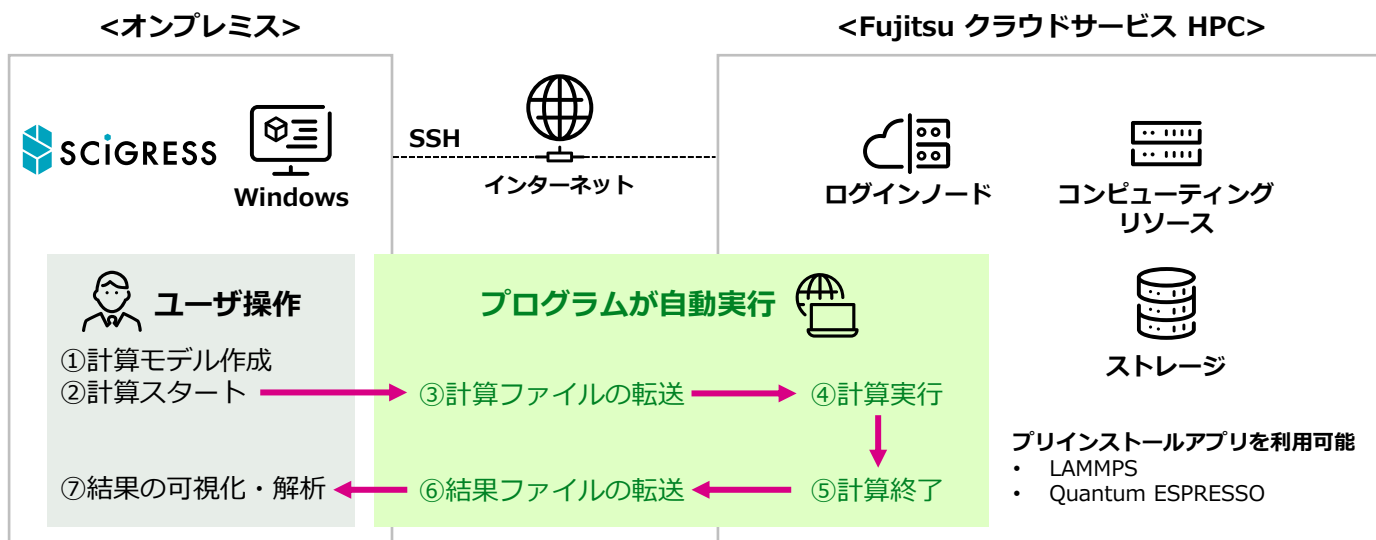
計算化学統合プラットフォーム SCIGRESS は、直感的なGUI操作で分子シミュレーションのモデル作成・計算実行・可視化・解析ができるソフトウェアです。

様々な種類のモデルを作成するビルダー機能、様々な計算エンジンとの連携機能によって、幅広い分野でご活用いただけます。

Windows上で作成した分子シミュレーションのサンプルをFujitsu クラウドサービス HPC上で実行し、計算結果をWindows上で可視化・解析することができます。

## 接続・利用イメージ

FujitsuクラウドサービスHPC上の計算化学プログラムをGUI上で操作できます。



※計算はlocalhostで実行することも可能

## サービス組合せ例

| サービスメニュー            |                                     | 利用量     | 月額料金 (円)<br>(税抜) | 計   |
|---------------------|-------------------------------------|---------|------------------|---|
| HPCバジェット (基本料金5) ※  | x86システムで動作確認済み                      | 基本バジェット | 50,000           | 87,100  |
| 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)       | 1台      | 6,700            |   |
| ヘルプデスクサービス          | ベーシック                               | -       | 無償               |   |
| SCIGRESS 必須モジュール    | Basic                               | 1ライセンス  | Ask              | お問い合わせください<br>永久・月額ライセンス、<br>その他モジュール等、<br>ご要望に合わせた柔軟な<br>ライセンス構成が可能です。 |
| SCIGRESS オプションモジュール | MD I/F<br>(LAMMPS利用の場合)             | 1ライセンス  | Ask              |   |
|                     | 第一原理 I/F<br>(Quantum ESPRESSO利用の場合) | 1ライセンス  | Ask              |   |

※HPCバジェット (基本料金5) : 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バジェットを5万円分利用可能です。

SCIGRESSの製品概要は右記サイトをご参照ください。 <https://www.fujitsu.com/jp/scigress/>

富士通株式会社

Hybrid IT事業本部 CaaS基盤グループ

Fujitsu クラウドサービス HPC  
ご紹介サイト  
[jp.fujitsu.com/solutions/cloud/hpc/](https://jp.fujitsu.com/solutions/cloud/hpc/)

