

次世代流体解析ソフトウェア

Advance Soft

# Advance/FrontFlow v2.0

● 定価 105万円 (年間使用料金)

Advance/FrontFlowは、乱流現象の予測と制御が重要な課題であること、多いエネルギー流動(流れ、熱、音など)の予測シミュレーションを主な対象に、ラージ・エディ・シミュレーションを基礎とする大規模解析に対応したソフトウェアです。燃焼・化学反応・騒音などの複雑現象の予測に適するredと、騒音・キャビテーションなどの複雑現象の予測に適し、水力機械などの性能評価に豊富な解析実績があるblueの2つのソルバーを備えています。

## ドアミラーから発生する乱流音の解析

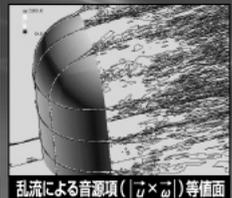
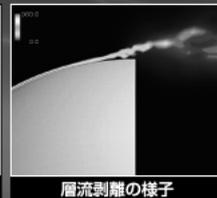
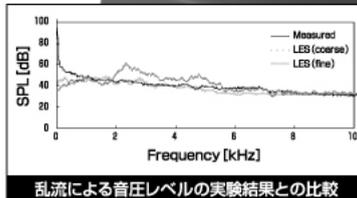
車のドアミラーから発生する騒音を定量的に予測し、発生メカニズムを解明することを目的として、ドアミラーまわり非定常流れのLES解析を実施した。実験値との比較の結果、ミラー表面圧力およびミラーから発生する流体内の音圧レベルを定量的に予測できることを確認した。



渦中心線の可視化結果

### 特徴

- ラージ・エディ・シミュレーションによる高精度で大規模な乱流シミュレーション
- 燃焼、表面反応、騒音、キャビテーションなど乱流と連成したマイクロ現象の予測



提供：東京大学 加藤千幸 研究室

# アドバンス ソフトの 次世代解析ソフトウェア/ 受託解析

## 地球シミュレータ活用サービス/受託解析

- 地球シミュレータに最適化されたシミュレーション・ソフトウェアがご利用可能です。
- 地球シミュレータの利用技術を有し、かつ、高度な解析技術を有する技術者が対応します。
- バイオ、ナノ、流体、構造、及び、これらの連成などの大規模・複雑な解析に対応します。

### アドバンスソフトの書籍/CD

- ① タンパク質量子化学計算  
-ProteinDFの夢と実現-(付録CD付)
- ② フラグメント分子軌道法入門  
-ABINIT-MP-(付録CD付)
- ③ 第一原理シミュレータ入門  
-PHASE&CIAO-(付録CD付)
- ④ 次世代流体解析ソフトウェア  
Advance/FrontFlow/red (付録CD付)
- ⑤ 21世紀の産業革命  
コンピュータ・シミュレーション  
(戦略的基盤ソフトウェア産業応用推進協議会編)
- ⑥ CIAO による擬ポテンシャル  
データベース (CD-ROM)
- ⑦ Protein DFによる  
タンパク質量子化学計算事例集 (CD-ROM)
- ⑧ 第一原理シミュレータPHASE計算事例集 (CD-ROM)

## アドバンスソフト社の 次世代解析パッケージソフト群

- Advance/ProteinDF  
タンパク質量子化学計算ソフトウェア
  - Advance/BioStation  
タンパク質-化学物質相互作用解析システム
  - Advance/PHASE  
ナノ材料第一原理計算パッケージ
  - Advance/FrontFlow  
次世代流体解析ソフトウェア
  - Advance/FrontSTR (旧名: Advance/pSAN)  
構造解析用有限要素解析パッケージ
- \*東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果(ソフトウェア)をアドバンスソフト株式会社が商用ライセンスの許諾を受けて、独自に改良したものです。

科学計算ソフトウェア  
開発技術者募集中

新卒(2007年修了の修士、博士)ならびにキャリア(大卒/実務経験3年以上、32歳迄)  
創造力豊かなソフトウェア開発に意欲のある方。弊社ホームページ人材募集ページからエントリー下さい。

## Advance ソフトウェアの 3大特徴

「戦略的  
基盤ソフトウェア」  
をベースにした  
世界最先端ソフト

低価格/高品質

開発元としての  
最高品質  
ユーザサポート

流体解析・構造解析の受託解析や  
受託開発のご用命も承っております。  
お気軽にご相談ください。

お客様のニーズに合わせて、ソースコードから  
柔軟・迅速なカスタマイズが可能です。

● セミナーなどの予定はWebページをご覧ください。●

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

デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト  
アドバンスソフト株式会社

お問い合わせ先

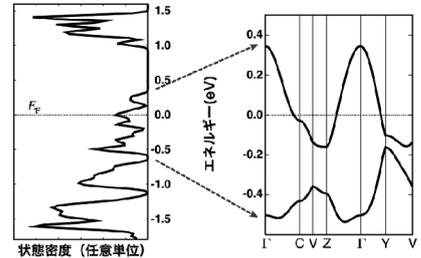
〒107-0052 東京都港区赤坂1-9-20 第16興和ビル南館7階  
TEL (03) 5570-1681 (営業) FAX (03) 5570-1683

# ナノ材料第一原理計算パッケージ

定価 105万円  
(年間使用料金)

## Advance/PHASE v1.2

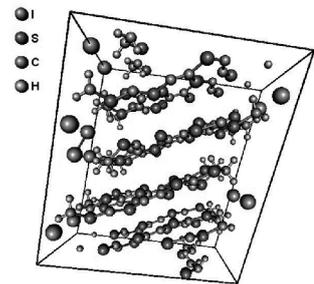
Advance/PHASE (アドバンス/フェイズ) は擬ポテンシャルと密度汎関数を用いた第一原理計算ソフトウェアです。結晶データベースから簡易操作によって、入力座標データを生成し、状態密度、バンド構造をはじめ、弾性定数や誘電率など様々な材料特性を計算します。また、バルクの性質だけでなく、表面や界面にも適用可能です。表面の酸化や触媒などの化学反応、AFMやSTMによる表面構造の解析に威力を発揮します。



状態密度 (任意単位)

### Advanceソフトウェアの3大特徴

- 「戦略的基盤ソフトウェア」をベースにした世界最先端ソフト
- 開発元としての最高品質ユーザサポート
- 低価格/高品質



アドバンスソフトの

## 地球シミュレータ活用サービス/受託解析

(独) 海洋研究開発機構殿の運用する「地球シミュレータ」は、実用問題に対して世界最高の実効性能を誇るスーパーコンピュータであり、産業界における利用や応用普及が積極的に推進されています。アドバンスソフトは、「地球シミュレータ」の活用技術を有し、お客様の課題に対して高精度な解析結果を、最速ターンアラウンドで提供致します。地球シミュレータ活用のためのソフトウェア受託開発や受託解析など、お客様の様々なご要望にお答え致します。お気軽にお問合せ下さい。

### ■特徴

- 地球シミュレータで利用可能なシミュレーション・ソフトウェアを用意
- 地球シミュレータの利用技術を有し、かつ、高度な解析技術を有する技術者が対応
- パイオ、ナノ、流体、構造、及び、これらの連成などの大規模・複雑な解析に対応

### ■地球シミュレータ用ソフトウェア

- 流体解析分野 (Advance/FrontFlow)
- 構造解析分野 (Advance/FrontSTR)
- 材料ナノ解析分野 (Advance/PHASE)
- タンパク質・化学物質相互作用解析 (Advance/BioStation)
- 流体 - 構造連成解析

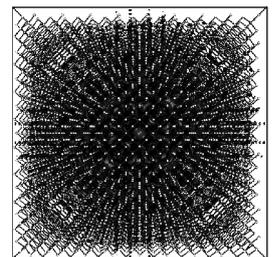
### Advance/PHASEを用いた地球シミュレータによる解析例

半導体の浅い不純物準位の構造、特にバレー分裂効果の把握、Si中のAsドナー準位の濃度依存性、帯電効果、不純物元素依存性などを解析。

380ノード (3040cpu) を使い、Si5800個中にAs1原子を計算。

### 〈実績〉

- ・ベクトル化率：99.4%
- ・並列化率：99.98%
- ・性能比：64%



Si5831As

左記製品は、東京大学生産技術研究所計算科学技術連携研究センターが実施した文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果(ソフトウェア)をアドバンスソフト株式会社が独自に改良したものです。アドバンスソフト株式会社は「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトに参加しソフトウェアの開発を行いました。

デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト

アドバンスソフト株式会社

●お問い合わせ先

〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル 南館7階

TEL: (03) 5570-1681 FAX: (03) 5570-1683

URL: <http://www.advancesoft.jp/>

Advance Soft  
デジタルエンジニアリングのアドバンスソフト



記載されている製品名、会社名は各社の商標または登録商標です。

高精度!

# アドバンスソフト

# の次世代解析ソフト

## タンパク質の精密な全電子計算が実行できるソフトウェア

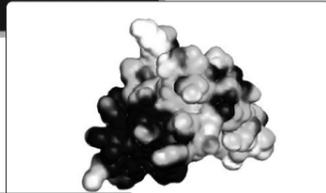
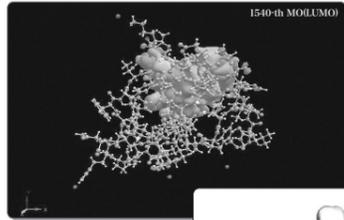
◆タンパク質量子化学計算ソフトウェア◆

## Advance/ProteinDF

定価105万円(年間使用料金)

- タンパク質を細分化せずに量子計算を実行
- 金属タンパク質に対応
- 非常に優れた初期値の自動作成機能
- 高精度計算

タンパク質は生体の中で多様な機能性を発揮します。生体内でのタンパク質は数kcal/molのエネルギーでさまざまな反応を起こします。タンパク質の機能研究を行うためには、精密な精度をもつ計算が必要となります。タンパク質量子化学計算ソフトウェアProteinDFはより精度の高い計算を実行するために、タンパク質を細分化することなく丸ごと取り扱います。



▲インスリン単量体のHOMO(上)と表面上の静電ポテンシャル(下)

### Advance/ProteinDFの機能

#### ◆計算の前処理

- ・水素付加
- ・構造妥当性評価
- ・タンパク質の中性化

#### ◆初期値の作成

- ・擬カノニカル局在化軌道法を採用
- ・ジスルフィド結合対応
- ・ヘテロ分子対応
- ・複数ペプチド鎖対応

#### ◆密度汎関数法プログラム

- ・100残基規模のタンパク質対応
- ・金属タンパク質対応
- ・RKS、UKS計算対応

#### ◆計算結果解析

- ・HOMO-LUMOギャップの計算
- ・原子ごとのマリケン電荷の計算
- ・残基ごとのマリケン電荷の計算
- ・分子軌道の等値面表示
- ・静電ポテンシャルの表示

#### ●タンパク質波動関数の計算実績 (抜粋)

タンパク質	残基数	原子数	軌道数
インターロイキン4	133	2198	11909
サイトカイン受容体	102	1660	9320
コクリン	100	1475	8196
シトクロムc	104+HEM	1738	9600
インスリン6量体	306	4716	26766

「ProteinDFによるタンパク質量子化学計算事例集(CD)」発売中!  
定価2,100円(税込)

## タンパク質と化学物質との相互作用解析のための量子計算ソフトウェア

◆タンパク質-化学物質相互作用解析システム◆

## Advance/BioStation

定価105万円(年間使用料金)

- タンパク質、DNA、糖、低分子およびこれらの複合体に対応
- フラグメント間相互作用解析が量子計算で可能
- 並列化による高速・高精度計算

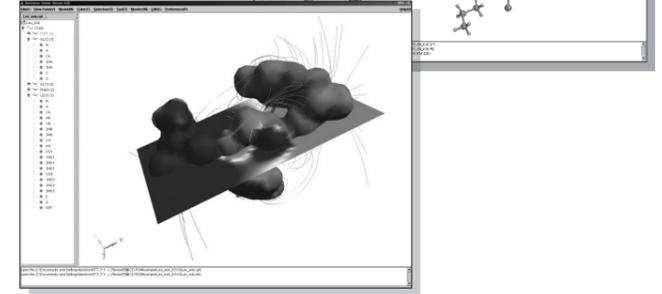
#### 適用テーマ例

- (1) 受容体とそのリガンドとの結合エネルギー評価
- (2) リガンドの設計・探索、受容体の設計・探索
- (3) 特定物質間の詳細な相互作用解析

#### Advance/BioStationの機能

- ・計算法 制限つき HF法、FMO-HF法、FMO-MP2法
- ・基底関数 STO-3G、6-31G、6-31G\*、6-31G\*\* など
- ・計算できる量 フラグメント間相互作用エネルギー、全エネルギー、フラグメント分子軌道、電子密度、静電ポテンシャル、電場
- ・フラグメント分割 自動分割: タンパク質、DNA、糖鎖 GUIによる分割: 大きな低分子
- ・構造最適化 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) 法、共役勾配法
- ・専用の可視化・解析ツール BioStation Viewer が付属

インタラクティブなGUIによる解析が可能



## 関連書籍

### タンパク質量子化学計算 -ProteinDFの夢と実現-

本書では、新規の研究分野であるタンパク質の量子化学計算について量子化学計算ソフトウェア「ProteinDF」を軸として解説しています。量子化学計算の必要性、近い将来の見通し、ProteinDFプログラムが採用している理論と方法について解説した後、計算事例として、インスリンという糖尿病の薬でもあるタンパク質を取り扱います。

■定価 ¥3,150(本体価格¥3,000+税¥150) ■発行所 アドバンスソフト ■ISBN 4-9902143-0-7

### フラグメント分子軌道法入門 -ABINIT-MPIによるタンパク質の非経験的量子化学計算-

本書は、Ab initio FMO法プログラムABINIT-MPと、その可視化・解析プログラムであるBioStation Viewerの使用方法について解説したものです。

■定価 ¥3,150(本体価格¥3,000+税¥150) ■発行所 アドバンスソフト ■ISBN 4-9902143-1-5

### ●ADVANCEソフトウェアの特徴●

「戦略的ソフトウェア」を  
ベースにした世界最先端  
ソフト

開発元としての高品位な  
ユーザサポート

低価格/高品質

### アドバンスソフトの地球シミュレータ活用サービス

(独) 海洋研究開発機構殿の運用する「地球シミュレータ」は、実用問題に対して世界最高の実効性能を誇るスーパーコンピュータであり、産業界における利用や応用普及が積極的に推進されています。アドバンスソフトは、「地球シミュレータ」の活用技術を有し、お客様の課題に対して高精度な解析結果を、最速ターンアラウンドで提供致します。地球シミュレータ活用のためのソフトウェア受託開発や受託解析など、お客様の様々なご要望にお答え致します。お気軽にお問合せ下さい。

- 特徴:
  - ・地球シミュレータに最適化されたシミュレーション・ソフトウェアがご利用可能です。
  - ・地球シミュレータの利用技術を有し、かつ、高度な解析技術を有する技術者が対応します。
  - ・バイオ、ナノ、流体、構造、及び、これらの連成などの大規模・複雑な解析に対応します。

### 受託開発・受託解析

アドバンスソフト社はパッケージソフトウェアの販売ばかりでなく、ソフトウェアの受託開発やシミュレーションの受託解析業務など、お客様の様々なご要望にお答え致します。お気軽にお問合せ下さい。

### 科学計算ソフトウェア開発技術者募集中

新卒(2007年修了の修士、博士)ならびにキャリア(大卒/実務経験3年以上、32歳迄)。創造力豊かなソフトウェア開発に意欲のある方。当社ホームページ人材募集ページからエントリー下さい。

### アドバンスソフト社の次世代解析パッケージソフト群

- ・Advance/PHASE ..... ~ナノ材料第一原理計算パッケージ~
- ・Advance/FrontFlow ..... ~次世代流体解析ソフトウェア~
- ・Advance/FrontSTR [旧Advance/pSAN] ..... ~構造解析用有限要素解析パッケージ~

※上記製品は、文部科学省ITプログラム「戦略的基盤ソフトウェアの開発」プロジェクトの成果物(ソフトウェア)をアドバンスソフト株式会社が独自に改良したものです。

### アドバンスソフト株式会社

お問い合わせ先 〒107-0052 東京都港区赤坂1丁目9番20号 第16興和ビル南館7階 TEL:(03)5570-1681 FAX:(03)5570-1683

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

記載されている製品名、会社名は各社の商標または登録商標です。

