

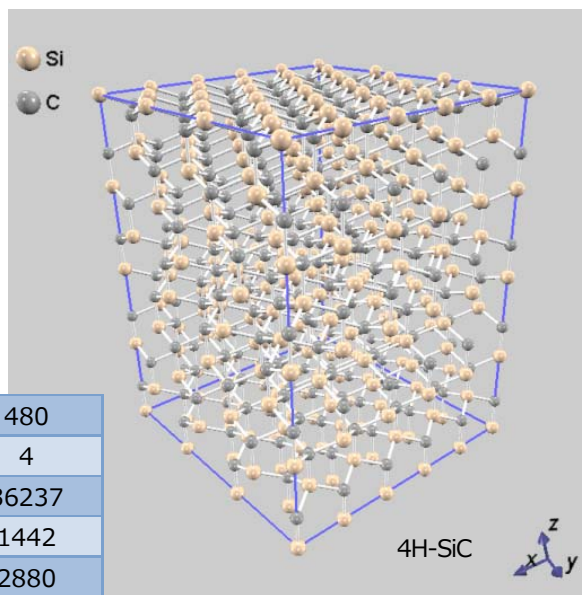
第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE Xeon Phi 対応版

※2014年冬リリース予定



～ 大規模計算を大幅に高速化 ～

Advance/PHASE が Intel 社のコプロセッサ **Xeon Phi** に対応しました。弊社独自の実装方式により、計算時間が大幅に高速化されます。今まではスーパーコンピュータでしか計算できなかった大規模系が、お手元のマシン 1 台で計算可能になります。



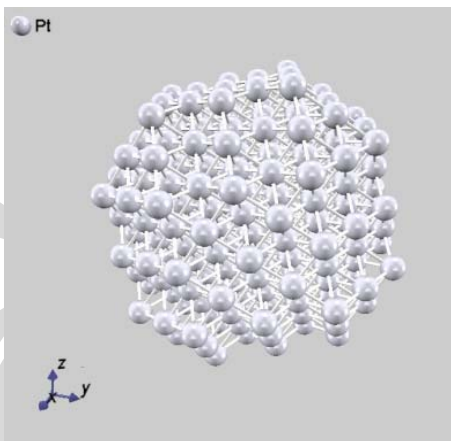
Xeon Phi により CPU45.2 コア相当の高速化を実現

※ 4H-SiC での計測値(計算の詳細は右表を参照)
※ CPU の計算には、Xeon X5660 の 1 コアのみを使用

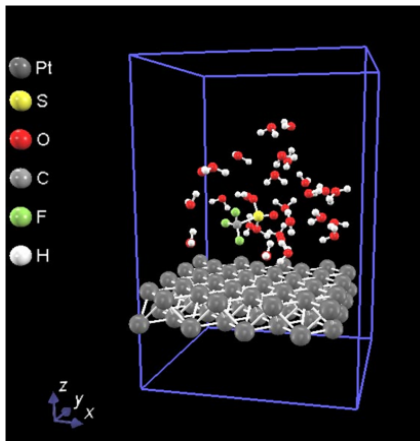
原子数	480
k 点数	4
平面波数	36237
バンド数	1442
射影演算子数	2880

計算対象

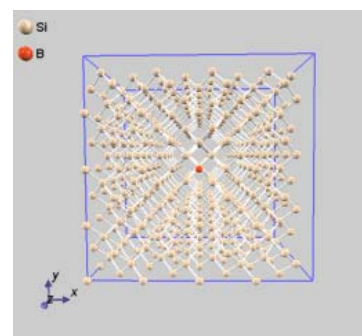
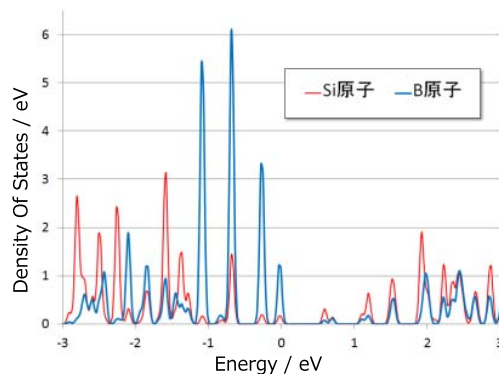
- 不純物や欠陥構造を含む固体の SCF・バンド計算 (500 原子程度)
- 100~300 原子系の第一原理分子動力学計算
- 不整合界面の高精度なシミュレーション
- フラーレン、カーボンナノチューブ等のナノカーボン材料
- 貴金属ナノクラスター



白金ナノクラスター
(直径: 2 nm)



151 原子系の第一原理 MD



Si₅₁₁B の原子当たりの状態密度

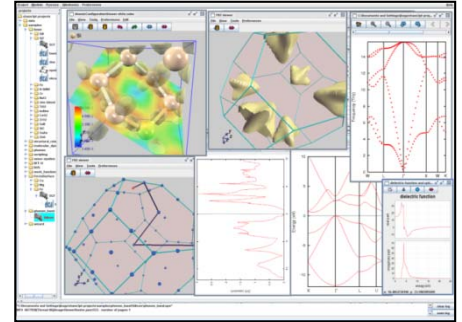
† Xeon および Xeon Phi は、アメリカ合衆国およびその他の国における Intel 社の登録商標です。

Advance/PHASEの概要

～ ナノテクノロジー研究開発を強力に支援する第一原理計算ソフトウェア ～

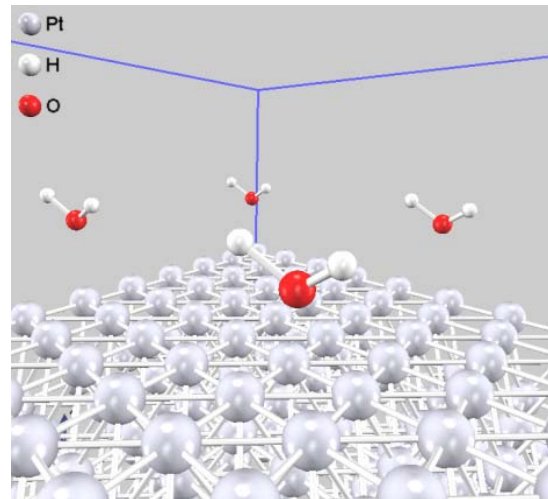
Advance/PHASE は、密度汎関数理論と擬ポテンシャルを用いた平面波展開による第一原理計算ソフトウェアです。

量子力学に基づき電子状態を求めるので、精度の高い計算結果を得ることができます。既存材料の分析だけでなく、新規材料の設計にもご活用いただけます。



主な特長

- ・金属、絶縁体、半導体、磁性体、誘電体、圧電体、ハーフメタル有機材料、有機半導体 等、あらゆる材料の取り扱いが可能
- ・開発元として責任を持ったユーザーサポート
- ・卓越したコストパフォーマンス
- ・最新バージョンは 3.3 (2014 年夏リリース予定)



計算機能

基本機能	全エネルギー計算、原子位置の最適化、計算ユニットセルの自動最適化
汎関数	局所密度近似、一般化勾配近似、hybrid 汎関数、DFT+U、van der Waals 補正、厳密交換汎関数 (EXX-OEP)
電子状態解析	電荷密度：全電荷密度、部分電荷密度 状態密度：全状態密度、原子分割局所状態密度、層分割局所状態密度、射影状態密度 各原子あたりの電荷量、Born 有効電荷
磁性解析	電子スピン分極解析、スピン-軌道相互作用による磁気異方性
光学特性	誘電関数(電子系および格子系)、非線形感受率、X線光電子分光 [†] 、 EELS(電子エネルギー損失分光)[†] † Advance/CIAO(別売)が必要です。
分子動力学	NVE および NVT
反応経路探索	Nudged Elastic Band 法、メタ・ダイナミクス法
雰囲気制御	Effective Screening Medium 法、 3D-RISM-SCF 法
Post SCF 解析	ストレス・テンソル、仕事関数、圧電定数、STM・AFM 像
解析支援	付属 GUI による入力ファイル作成および計算結果の可視化

※赤い太い文字は、Ver. 3.3 の新機能

動作環境

OS	<ul style="list-style-type: none"> ・ Windows 7 (64bit OS) ・ Red Hat Enterprise Linux 5 以上 (AMD64, Intel 64 のみ)
コプロセッサ	<ul style="list-style-type: none"> ・ Xeon Phi (5100 系) ・ Xeon Phi (7100 系)
並列計算	・ 単一の計算機内での共有メモリー並列

Advance/PHASE は、東京大学生産技術研究所革新的シミュレーション研究センターが実施した文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトおよび「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」プロジェクトの成果 (ソフトウェア) をアドバンスソフトが商品化したものです。アドバンスソフトはこれらのプロジェクトに参加しソフトウェアの開発を担当しましたが、その成果を独自に改良して商用パッケージソフトウェアとし、販売保守を行っております。



アドバンスソフト株式会社

詳しい情報をご希望の方は、まずはお問い合わせください。

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西
TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580 URL: <http://www.advancesoft.jp/>
E-mail: office@advancesoft.jp