

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名:コンサルティング

科学技術計算コードの開発、データベース構築などの請負、コンサルティングを通して 業務をご支援します。

弊社では 計算コードの開発のために 現象のモデリングや必要な調査等を含めて 戦略的なご支援を申し受けます。

支援フロー ;

仕様打ち合わせ

調査

仕様決定

開発/ 調査

納入・導入

フォロー

製品概要

下記の分野の技術をご提供します。

- ・材料設計
- ・電子状態計算
- ・メゾスコピック領域の動力学計算
- ・流体計算
- ・電磁界計算
- ・反応速度論計算
- ・既存プログラムの並列化改良
- ・既存プログラムの書き換えや改修
言語の書き換え
サブルーチンの再構成、データ構造の整理
- ・既存プログラムへの新たな計算機能付加
- ・市販ソフトへの外部プログラムインターフェイス作成
- ・Webアプリケーション

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名:材料設計

古典的なニュートン力学による分子動力学、量子力学、統計力学をベースに 材料設計のご支援をします。

ここでは目的に適った モデリングや最適評価方法を選択し アルゴリズム作成、プログラムコーディング を行います。

例) 新規Li電池材料の材料計算

- ・量子力学/ 分子動力学計算による結晶構造最適化
- ・量子力学計算によるエネルギー計算
 - ・熱学計算による起電力計算
- ・量子力学計算による電子構造評価
 - バンド構造、担体有効質量評価
- ・分子動力学計算によるLi原子移動活性化過程評価

製品概要

- ・ニュートン力学によるMD計算
- ・量子力学による 電子状態計算
- ・第1原理分子動力学計算
- ・統計力学 熱学計算 輸送係数計算

- ・ニュートン力学をベースにしたメゾスコピック領域の動力学計算

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: 第1原理分子動力学

量子力学による電子状態計算と古典分子動力学計算による力場計算の組み合わせにより結晶構造を決定します。

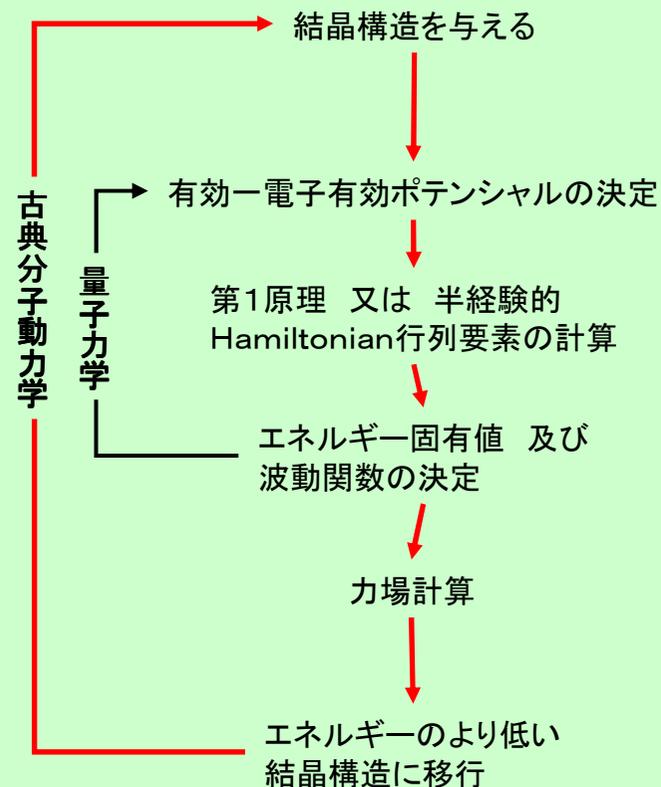
量子力学計算には第1原理によるものと半経験的な方法があり目的や精度に応じた使い分けを行います。

ここで得られる知見は下記のものであります。

- ・結晶構造 … 構造因子
- ・結晶の電子状態 … バンド構造、状態密度、担体有効質量
- ・固体内原子の挙動 … 拡散速度

弊社では目的に合わせた手法選択やコード開発、材料評価・開発のためのknow-howをご提供します。

製品概要



製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: 電子状態計算

新たな材料開発で目的とする材料に特定の機能と構造を付与することを試みる場合、量子力学に基づく議論は不可欠です。

シミュレーション予測による電子材料研究の効率化を図る事が出来ます。

対象とする材料は

分子、高分子、クラスター、溶液

金属、半導体、超伝導体、磁性体

メゾスコピック系

量子デバイス

生体物質

ソフトマテリアル

で、目的物質に応じた最適な手法選択やモデリング、コード開発、知見をご提供します。

製品概要

下記量子力学計算の特徴を生かしながら、またニュートン力学に基づく古典MDや熱統計力学を組み合わせることにより、効率的な材料開発を支援します。

第一原理(ab-initio)計算

密度汎関数(DFT)または分子軌道(MO)法の計算、物質の構成元素と構造を与えて、電子論的性質を再現させる、ということが目標。計算時間は長いが精度は高い。

半経験的計算

計算は高速。第一原理計算の1/10以下の時間。パラメータをうまく決定できれば、精度の向上が可能。パラメータの例としては、AM1、MNDO、PM3、ZINDOなど。ただし、周期表のあらゆる元素を計算できるわけでない。s、p軌道のみを持つ原子はほぼ全部扱える。

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: ニュートン
力学による MD計算

ニュートン力学による古典的分子動力学により結晶構造評価や拡散など固体内現象を計算します。

- ・動径分布関数
- ・熱力学的性質
- ・輸送係数
- ・分光光学特性

これらは 固体内での析出による 機械強度変化や 電池材料でのLiなどの移動粒子の挙動解析、赤外吸収スペクトル解析 他に適用できます。

目的物質に応じた最適な手法選択やモデリング、コード開発、知見をご提供します。

製品概要

ニュートン力学をベースにした動力学計算

- ・ポテンシャルモデル
 - ・ペアポテンシャル
 - ・ペア汎関数ポテンシャル
 - ・クラスタポテンシャル
 - ・クラスタ汎関数ポテンシャル
- ・統計集団
 - ・定エネルギー、定温、定圧、定温・圧、定ケミカルポテンシャル、グランドカノニカル
- ・数値解法
 - ・ベルレ法、ギア法、タッカーマン-バーン法

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: メソスコピック 領域の 動力学計算

コロイド分散系の微細粒子の挙動、自己配列や凝集過程解析、レオロジー特性評価はこの領域の動力学計算によります。

ナノパーティクルを応用し機能性を付加するコロイドの設計やナノマテリアルを用いた材料形成過程を解析するための手法です。

弊社の豊富な経験に基づき ブラウン、ランジュヴァン、ストークスの各動力学によるコード開発や知見をご提供します。

製品概要

・ブラウン動力学、ランジュヴァン動力学 ……コロイド分散系のブラウン運動をランジュヴァン方程式で記述、溶質分子の挙動を計算し下記を解析。

自己配列・凝集構造、
表面張力や表面間力、
界面マイクロ構造

・ストークス動力学 ……粒子間の流体力学的な相互作用を考慮した動力学でストークス方程式により計算し 下記を解析。

レオロジー特性や潤滑効果、
凝集構造、
血液循環状態

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: 電磁界解析

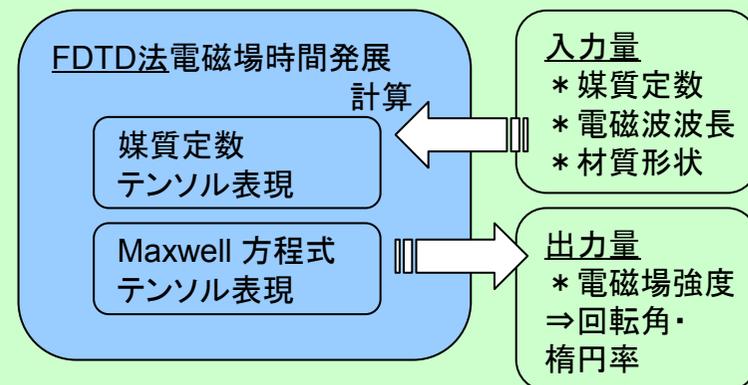
マックスウエル方程式を解くことにより 電磁界強度計算を行い 電磁界解析や光学解析に用います。

- ・マックスウエル方程式
 - ・誘電率他の媒質特性、形状を入力
- ・電磁界解析
 - ・電磁波伝播解析
 - ・電子装置で発生する電磁場解析
- ・光学解析
 - ・グレーティングを持つ光学素子解析
 - ・磁気光学効果解析

媒質特性や計算する物理量などよりモデリング、最適手法を選択、目的に応じたコーディングを行います。

製品概要

- ・マックスウエル方程式による解析
 - ・周波数領域での解析 ...
 - 有限要素法 (FEM)、モーメント法 (MOM)、境界要素法 (BEM)
 - ・時間領域での解析 ...
 - 差分法 (FDTD)、空間回路網法、伝送線路法 (TLM)
- 例) 差分法 (FDTD) による磁気光学効果解析



製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: 反応速度論計算

気体や液体、固体内の各種の反応過程を反応速度論に基づいた rate equation により 算出します。

目的に合わせたモデリング、パラメーター設定とコーディングを行います。

製品概要

rate equation により反応種の数の変化(密度変化)を計算します。
反応現象で生じる種の生成・消滅過程を計算するもので成膜過程などあらゆる反応過程に応用されるものです。

応用例 ;

- ・反応種の生成・消滅過程
- ・複合体形成・縮小過程
- ・プラズマCVDでの反応種の生成・消滅過程
- ・レーザー等による励起発光過程
- ・レーザー溶接でのプラズマ中の反応状態

入力パラメーター ;

- 初期濃度
- 励起速度
- 反応断面積・反応速度・遷移確率
- 各種の移動度

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: Aeolus (流体解析コード)

圧縮・非圧縮統一解法(CIP-GCUP法)による流体解析コードです。

この方法では対象物質の状態(固・液・気)によらず 同一のアルゴリズムで解くことが可能で 多成分系で反応を伴う流体の解析が出来ます。表のC、Dの領域に適した手法です。

	単相・単純 →	多相・複雑
低速流 ↓ 高速流	A・非圧縮性乱流 ・熱対流 ・物質拡散	C・気液2相流・燃焼解析 ・MHD、磁性流体、ERFなどの機能性流体现象 ・粉体流(極性流体モデル)
	B・圧縮性乱流 ・高速飛翔体 ・高速鉄道	D・レーザー加工・溶接 ・爆縮(レーザー核融合) ・ジェット・エンジン ・爆発・爆轟・プラズマ

製品概要

CIP-GCUP法による流体計算

CIP ; Cubic Interpolated Propagation
GCUP ; General Constraint Universal
Procedure

- ・圧縮・非圧縮統一解法
- ・爆発・燃焼など物理量の変化の大きな現象の計算
- ・気液2相流計算

高精度計算のためのグリッドの工夫

- ・マルチブロック
 - ・アダプティブグリッド
 - ・重なり格子法
- など 目的に応じた手法を選びます。

また 機能を付加したカスタマイズも承ります。

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名：流体計算

圧縮・非圧縮統一解法(CIP-GCUP法)による流体解析コード(Aeolus)を用いたカスタマイズされた計算コードを提供します。

弊社ではこのCIP-GCUP法と他のモジュールを結びつけプラズマCVDによる薄膜形成やレーザー加工など目的に応じたシミュレーターを作成します。

製品概要

プラズマCVD計算

- 下記各モジュールより構成されております。
- ・CVD装置内流れ解析計算(Aeolus)
 - ・電場・荷電粒子運動計算
 - ・化学反応・電離過程計算
 - ・成膜過程計算

ドライエッチング(RIE)計算

- 下記各モジュールより構成されております。
- ・RIE装置内流れ解析計算(Aeolus 他)
 - ・電場・荷電粒子運動計算
 - ・化学反応・電離過程計算
 - ・成膜過程計算

レーザー溶接計算

- 下記各モジュールより構成されております。
- ・固体・液体・気体相変化計算(Aeolus)
 - ・レーザー誘起プラズマ計算
(反応速度計算)
 - ・光線追跡計算
(壁面吸収と反射の繰り返し計算)
 - ・アシストガス(シールドガス)計算
- 目的に応じたモジュールとの組み合わせ設定が可能です。

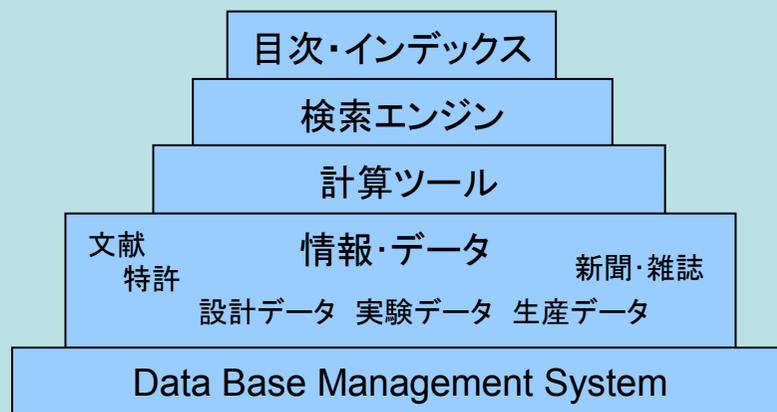
製品連絡先

住所：〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100

Advanced Algorithm & Systems (<http://www.aasri.jp>)

商品名: Webアプリケーション

ナレッジマネジメント用ツールとしてのプラットフォームを構築します。
ナレッジベース構築は全て手作りによるものとの認識で 目的とするナレッジベースと弊社の豊富な経験をうまく調和させ 最大限カスタマイズされたものをご提供します。



また 既存のアプリケーションの機能追加や改修、
スタンドアローンタイプのソフト作成も承ります。

製品概要

DBMS データベース構築
DBMS; Data Base Management System

機能

- ・RDBやOODBデータベース構築
RDB ; Relational Data Base
OODB ; Object Oriented Data Base

- ・グラフィカルインターフェイス

- ・各種検索エンジン
 - ・類似語検索
 - ・関連用語検索

- ・各種計算ツール

- ・拡張への対応・柔軟性

製品連絡先

住所: 〒150-0013 東京都渋谷区恵比寿1-13-6 恵比寿ISビル7F、tel: 03-3447-5501、fax: 03-3447-4100