

XA-CHEM-SUITE カタログ

2012年3月23日作成

※試用版も用意できる場合がありますのでご連絡ください

※永久ライセンスと年間ライセンス、もしくは一方のみがございます

※年間ライセンスは更新しないと停止します

※永久ライセンスは1年間保守費用が含まれます

※永久ライセンスの年間保守アップデートは永久ライセンスの半額です

※表示価格は税別です

XA-SSE/AVX-QM

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス		
アカデミック	¥48,000	¥36,000
官公庁・民間企業	¥72,000	¥48,000
サイトライセンス	¥500,000	¥300,000

※ Intel SSE/AVX に対応した Intel CPU のマシンのみ動作可能です

<加速対応機能>

RHF(ERI-J, ERI-K), FMO-ESP, DFT-XC, CD-MP2 & Single Point Energy

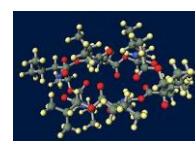
※ GAMESS-US 2010 R3 + patch + shared object の形式で配布いたします

※ 未対応機能は GAMESS-US 2010 R3 で補完します

<パフォーマンス>

SSE : Valinomycin($C_{54}H_{90}N_6O_{18}$)での計算時間の比較(RHF/3-21G)

	時間[秒]	エネルギー[a.u.]
GAMESS-US 2010 R3	625.55	-3750.92050181
GAMESS-US 2010 R3 + XA-SSE-QM	201.487	-3750.92050204



評価環境: Intel Core i7 860@2.80GHz(4core+4hyperthreading), Intel Fortran Compiler11 + MKL10.2

AVX

	時間[秒]	エネルギー[a.u.]
GAMESS-US 2010 R3	476.24	-3750.92050181
GAMESS-US 2010 R3 + XA-AVX-QM	149.69	-3750.92050173

評価環境: Intel Core i5 2500 @ 3.30GHz(4core), Intel Composer XE (12.0) + MKL 10.3

※ XA-SSE/AVX-QM 追加で GAMESS RHF が Full Core に対して 3.1 倍加速します。

※ 未対応機能を計算させた時は停止します。

XA-CUDA-QM

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングル GPU ライセンス		
アカデミック		
XA-CUDA-QM-GF (Geforce)	¥72,000	¥48,000
XA-CUDA-QM-TS (Tesla)	¥98,000	¥72,000
官公庁・民間企業		
XA-CUDA-QM-GF (Geforce)	¥98,000	¥72,000
XA-CUDA-QM-TS (Tesla)	¥150,000	¥98,000

※ NVIDIA 製の GPU が別途必要になります。

※ アカデミック、官公庁・民間共に Multi-GPU 対応版は枚数に応じた値段となります。

※ 未対応機能を計算させた時は停止します。

※ 計算機センターなど、大規模 GPU クラスタについてはご相談ください。

<加速対応機能>

RHF(ERI-J, ERI-K), FMO-ESP, DFT-XC, CD-MP2 & Single Point Energy / Opt / Freq

<パフォーマンス> ※2011年8月31日現在

PW91(DFT)がマルチコアに対して 3.6-4.0 倍、FMO がマルチコアに対して 3.3 倍

XA-PIO

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス		
アカデミック	¥198,000	¥98,000
官公庁・民間企業	¥300,000	¥198,000
サイトライセンス	¥1,500,000	¥998,000

※ 量子化学計算（現時点で閉殻系のみ対応）の結果を使って、大きな分子の関わる相互作用の特徴を視覚的に捉えることを目的にしています。

※ 現在は、Gaussian と GAMESS-US の結果のみ対応しています。

※ OS は Linux（ディストリビューションは問わない）に対応しています。

※ Viewer は **XA-GUI** もしくは **Tencube/WM** を推奨します。

※ 藤本先生の PIO のソースコードを **30 倍以上**高速化したものです。

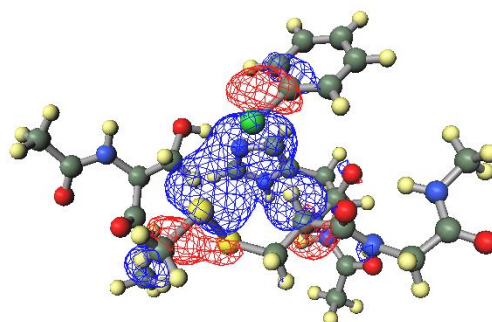
<パフォーマンス測定>

PhenylChloride とポリアミノ酸の相互作用解析

PIO	XA-PIO	XA-PIO
gfortran	gfortran	pgi-fortran
541.579	21.757	14.648

・ 単位：sec

・ 評価環境：Core2Duo 2.26GHz , Windows



Vista
※ **XA-GUI** からコールした結果です

XA-ER

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス アカデミック 官公庁・民間企業	¥0 ご相談下さい	
サイトライセンス	ご相談下さい	

※ エネルギー表示法による高速かつ高精度な自由エネルギー計算を目的にしています。
※ Linux x86_64 に対応しています。

XA-RANKING

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス アカデミック 官公庁・民間企業	¥198,000 ¥300,000	
サイトライセンス	¥998,000	

※ 弊社独自のランキングアルゴリズムを用いています。
※ 化合物の特徴（構造、特性、実験データ等）から、目的とする効用（薬効、毒性等）を示すかどうかを予測し、ランキング付けすることを目的にしています。
※ OS は Windows, Linux（ディストリビューションは問わない）に対応しています。

XA-RANKING-ADVANCE

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス アカデミック 官公庁・民間企業	¥300,000 ¥500,000	
サイトライセンス	¥1,200,000	

※ 弊社独自のランキングアルゴリズムを用いています。
※ XA-RANKING に、複数の化合物グループを同時に扱える機能が加わっています。
※ OS は Windows, Linux（ディストリビューションは問わない）に対応しています。

XA-GUI

	永久ライセンス	年間ライセンス
シングルノードライセンス	¥198,000	
サイトライセンス		¥630,000

※ XA-CHEM-SUITE の全機能が GUI からバッチで投げられる機能を搭載しています。



株式会社クロスアビリティ

113-0033 東京都文京区本郷 3-16-6 本郷コンドミニアム 801

TEL : 03-5800-7731

FAX : 03-5809-3099

EMAIL : qm@x-ability.jp

URL : <http://x-ability.jp/xasci.html>