

ADBS (Advance/BioStation) 高速/並列量子化学計算プログラム 開発

ADBBSは、タンパク質やDNAといった、巨大分子の量子化学計算が実行可能な非経験的電子状態計算プログラムです。ADBBSでは、フラグメント分子軌道法を採用することにより他の量子化学計算パッケージプログラムでは困難な計算も、高速に実行することが可能です。

ADBBS 開発の経緯

- 文部科学省の産学連携プロジェクト「戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト」およびその継続の「革新的シミュレーションソフトウェア開発プロジェクト」で開発
- アドバンスソフトはこのプロジェクトに産業界の中核的機関として参加
- 現在、独自に改良を重ねパッケージ販売等による事業化を進めている。

戦略的基盤ソフトウェア開発プロジェクト

本プロジェクトでは、研究成果をフリーソフトウェアとして公開し、世界に広く普及させ、デファクトスタンダードの地位を確立することを目指す。

同時に、本プロジェクトを推進するために設立したベンチャー会社 アドバンスソフト株式会社は、本プロジェクト終了後も独自に、ソフトウェアの改良・普及を事業として、継続して実施する(有料)。事業化により、継続的改良が可能となり、**事業化** **開発資金の獲得** **継続的改良** という正のフィードバックを確立する。

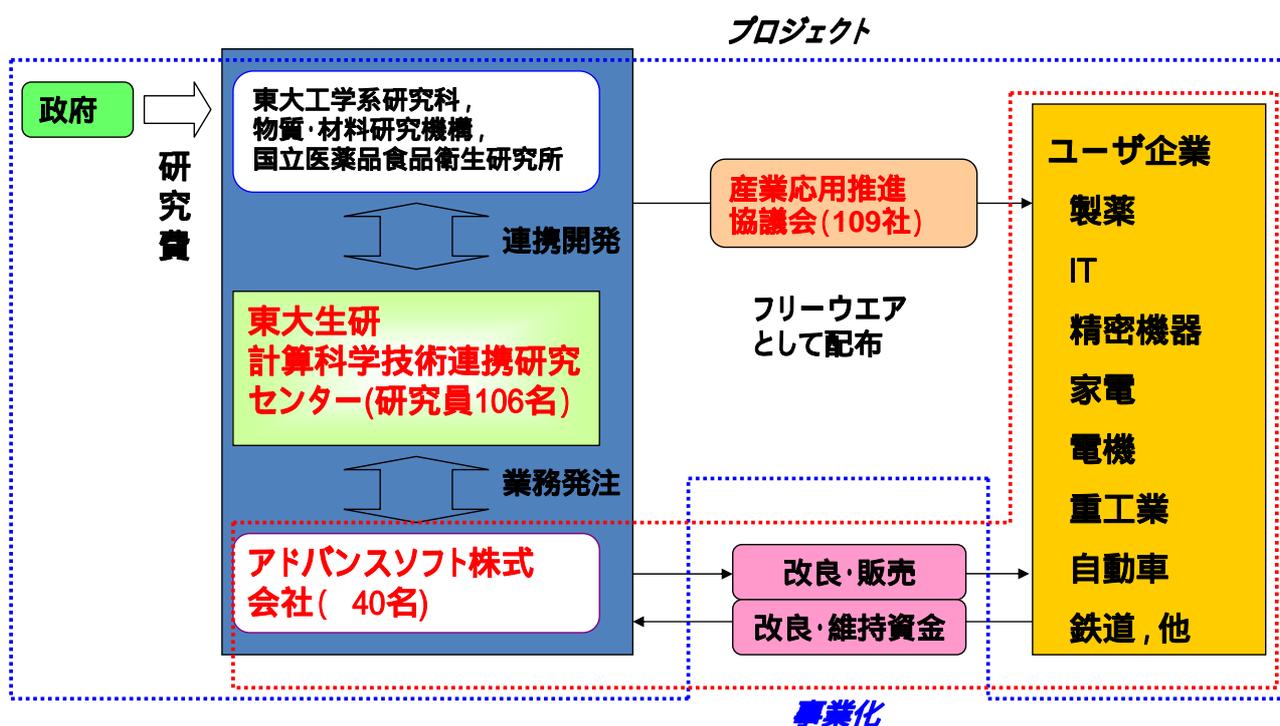
また、アドバンスソフト株式会社は、本事業終了後、本事業で育成した人材を採用し事業を継続・発展させていく。これにより、雇用を確保し(5年後の70名程度を予定)、我が国の計算科学技術用ソフトウェア開発・保守体制の確立に貢献する。

2010.6.28

アドバンスソフト株式会社

3

プロジェクトの体制

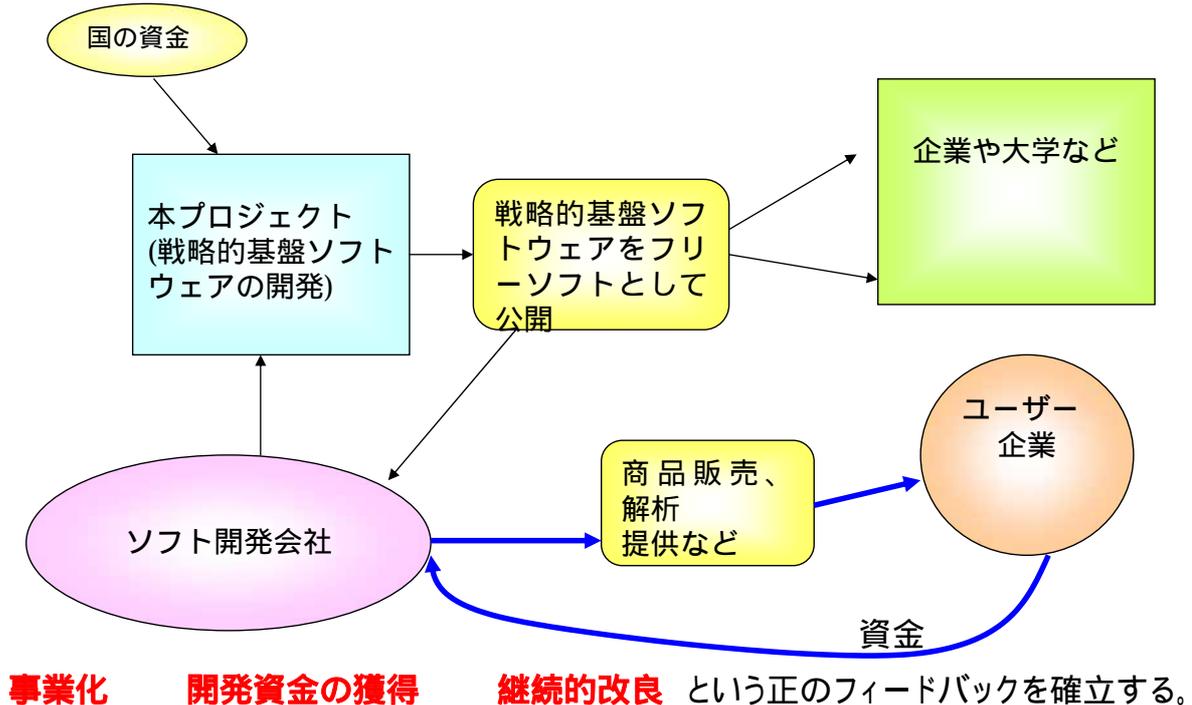


2010.6.28

アドバンスソフト株式会社

4

研究開発成果の事業化



2010.6.28

アドバンスソフト株式会社

5

ADBSバージョン3.2の新機能

新たな機能を追加し、大幅な機能向上を実現。
主な追加機能は以下の通り

- 高速なRI-MP2計算
- 密度汎関数理論(DFT)計算
- QM / MM計算

これらの機能は東京大学生産技術研究所が中心となって実施している「イノベーション基盤ソフトウェア開発プロジェクトで開発」していたが、「イノベーションプロジェクト」では開発を中断したのでアドバンスソフトが独自で引き続き開発を行っている。

2010.6.28

アドバンスソフト株式会社

6