

2010
06/28



アドバンスソフト技術セミナー
生体分子量子化学計算ソフトウェアAdvance/BioStation(ADBS)

ADBSの現在の開発状況について

アドバンスソフト株式会社
技術第2部 主事研究員
日野 理

5.

発表内容

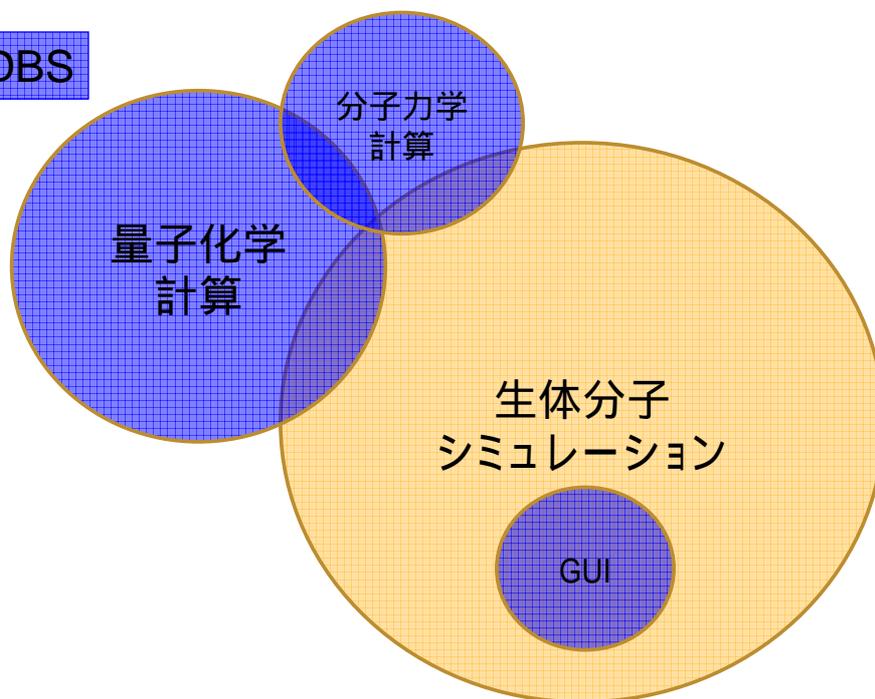
- ADBSの長期的な開発方針
- 大きな開発項目
- 新規開発機能



ADBSの長期的な開発方針

ADBSを有用なソフトウェアにするためには？

ADBS

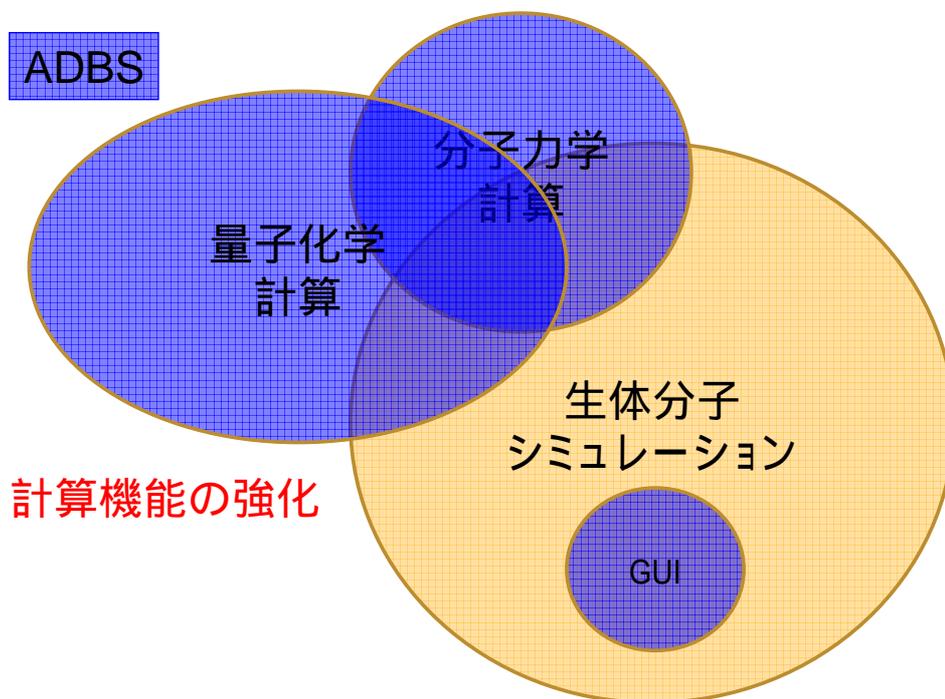


3

ADBSの長期的な開発方針

ADBSを有用なソフトウェアにするためには？

ADBS

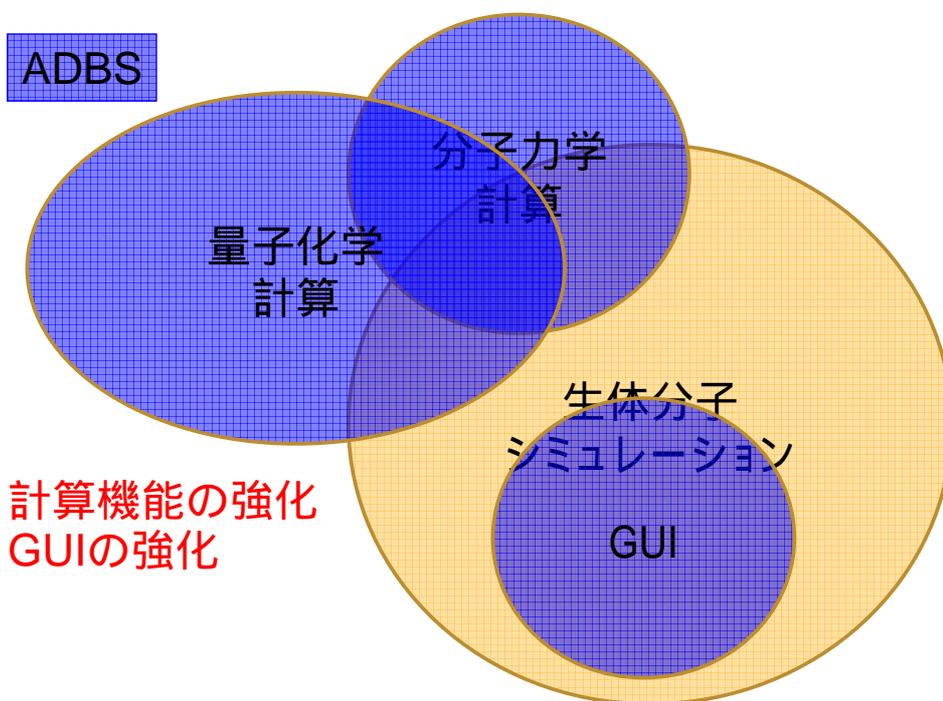


4

ADBSの長期的な開発方針

ADBSを有用なソフトウェアにするためには？

ADBS

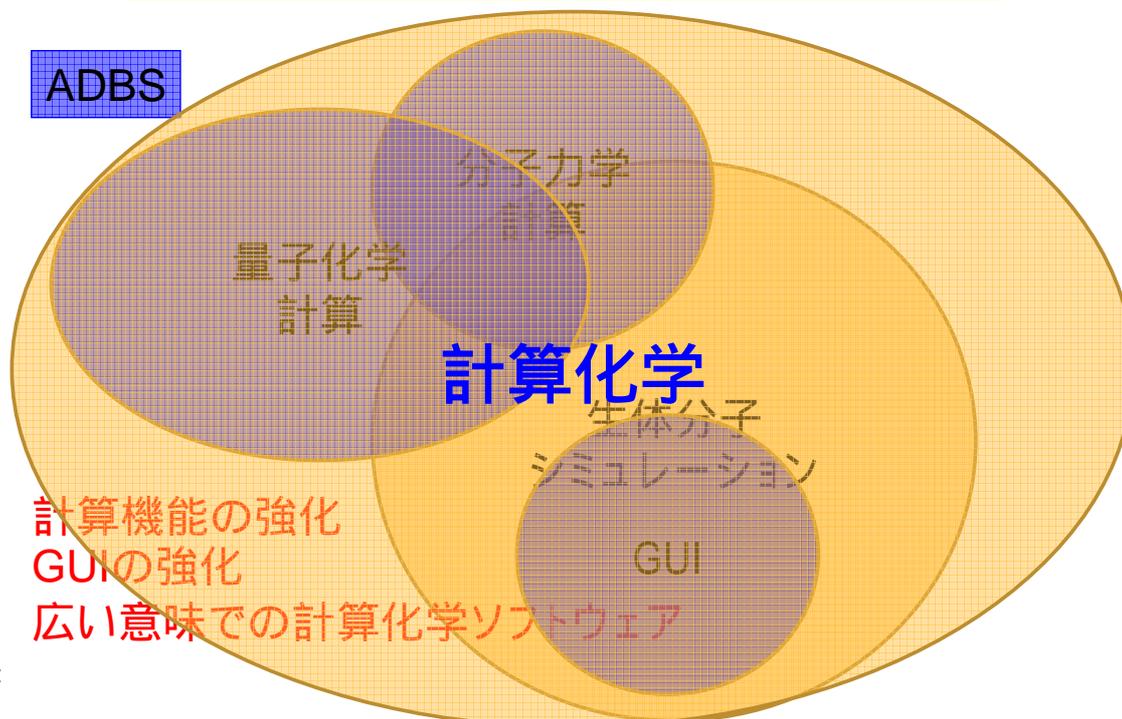


5

ADBSの長期的な開発方針

ADBSを有用なソフトウェアにするためには？

ADBS



6

大きな開発項目

- 大きな開発項目
- 計算エンジン
 - ✓ 計算速度/安定性の向上
 - ✓ エネルギー(孤立分子)以外の物理量計算
 - ✓ より詳細な計算結果解析機能
- GUI
 - ✓ 既存機能のリファインメント
 - ✓ 分子修飾機能
 - ✓ ランチャー機能



7

新規開発機能

- 新規開発機能
- 計算エンジン
 - ✓ RIMP2計算機能の改良(メモリ、ファイルアクセス)
 - ✓ DFT構造最適化機能
 - ✓ FMO-DFT収束安定化アルゴリズム
 - ✓ QM/MM計算機能の改良
 - ✓ 励起状態計算機能(TDDFT、RPA、CIS)
 - ✓ 分子力場設定機能(Amber、CHARMM、OPLS等)
- GUI
 - ✓ 入力ファイル作成機能のリファイン
 - ✓ 手動フラグメント分割機能のリファイン
 - ✓ ランチャー機能
 - ✓ リスタート機能との連携



8

まとめ

- ADBSの長期的な開発方針
- 大きな開発項目
- 新規開発機能

