引用文献について

本ソフトウェアの使用時には、以下の文献を引用してください。

myPresto 全体及び Filling potential 法について

cosgene : Multicanonical MD について

Particle Mesh Ewald (PME) について

Accessible surface area (ASA) について

Fast Multipole Method (FMM) について
7) W. T. Rankin,“Efficient Parallel Implementations of Multipole Based N-Body Algorithms.“PhD thesis, Duke University, Department of Electrical and Computer Engineering, P.O.Box 90291, Durham, NC 27708-0291, April 1999.
8) W. T. Rankin, DPMTA –Distributed Parallel Multipole Tree Algorithm, Duke University, Durham, NC (2002).

sievgene について

Multiple Target Screening (MTS) について


Docking Score Index (DSI)法について


Maximum Volume Overlap (MVO)法について