

GROMACS

世界最速クラスのオープンソース分子動力学 (MD) シミュレーションソフトウェア

GROMACS (GRONingen MACHine for Chemical Simulations) は、主にタンパク質、脂質、核酸といった生体高分子を対象に設計されたMDエンジンです。極限まで最適化されたアルゴリズムにより、ノートPCから世界トップクラスのスーパーコンピュータまで、あらゆる計算リソースの性能を最大限に引き出し、研究を加速させます。

圧倒的な計算スピード

最新CPUのSIMD命令セットをフル活用。さらに、NVIDIA、AMD、Intel製GPUによる強力なアクセラレーションと、CPU/GPU間の効率的な負荷分散により、他の追随を許さない計算速度を実現します。

生体分子への最適化

AMBER、CHARMM、OPLS-AAなど主要な力場に標準対応。レプリカ交換法や自由エネルギー計算など、創薬研究や複雑な構造変化解析に不可欠な高度なサンプリング手法を備えています。

優れた利便性と拡張性

直感的なコマンドライン操作で、複雑なスクリプトは不要です。数十種類の解析ツールが同梱されており、計算後のデータ処理もスムーズ。オープンソース (LGPL) であり、活発なコミュニティが研究を支えます。

標準的なシミュレーションのワークフロー

1

構造準備

PDBからの座標取得、水・イオンの付加

2

トポロジー作成

力場に基づく分子の定義

3

構造緩和・平衡化

エネルギー最小化と温度・圧力の安定化

4

本計算 (MD)

分子の動き (トラジェクトリ) を記録

5

解析

構造変化、熱力学量の算出など

主な応用分野



創薬研究

薬剤候補化合物と標的タンパク質の結合親和性評価



生命科学・基礎研究

膜タンパク質の機能解明、DNA/RNAの動的構造解析



材料科学

界面活性剤、脂質二重膜、高分子材料の特性評価

用途・解析規模・将来計画を見据えた最適なマシン構成をご提案

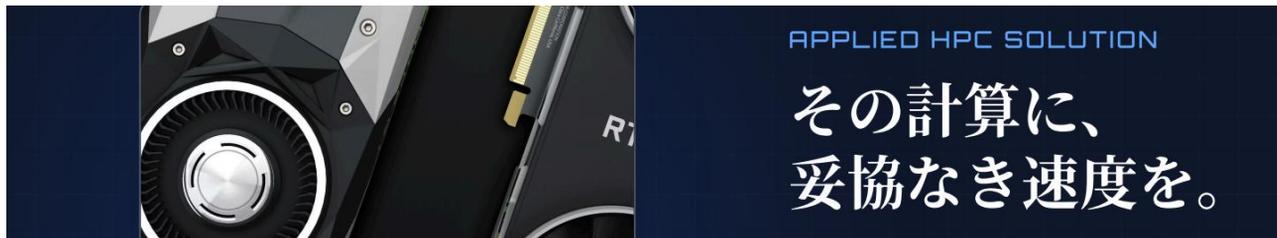
Ryzen™ Threadripper™ 9970X搭載 並列計算を極めたハイエンドワークステーション



カテゴリ	詳細仕様
筐体	タワー筐体
OS	Ubuntu 24.04 LTS (インストール代行込)
CPU	AMD Ryzen™ Threadripper™ 9970X (4.0-5.4GHz / 32C 64T / L3 128MB / 350W)
チップセット	AMD TRX50 チップセット
CPUクーラー	360mm 簡易水冷 (High-Performance Liquid Cooling)
メモリ	128GB (32GB x4) DDR5-5600 Registered ECC DIMM (1.2V / 2RANK)
ストレージ	2TB M.2 NVMe-SSD (読込:7300MB/s 書込:6600MB/s / PCIe 4.0)
グラフィックス	NVIDIA® GeForce RTX™ 5080 16GB-GDDR7 (10,752コア / PCIe 5.0) ※1年保証
光学ドライブ	非搭載
ネットワーク	10GbE x1 / 2.5GbE x1 (オンボード)
IPMI	非搭載
オーディオ	7.1ch HD オーディオ (前面:ライン・マイク / 背面:ライン)
電源ユニット	1,200W 80 Plus Platinum (ATX3.0 / PCIe 5.0 / 100V)
入力装置	有線日本語キーボード (テンキー付)、有線マウス
保証	3年間センドバック方式ハードウェア保証
備考	※GROMACSIは含まれておりません

標準構成価格 **オープン価格**

※3年間センドバック方式ハードウェア保証



こちらの機種は、幅広いカスタマイズに対応しています。

お客様のあらゆる計算ニーズに応えるための最適解をご提供
仕様構成に関するご質問・ご相談はお気軽にお申しつけください。