

生体高分子の動的振る舞いを高精度に予測する 世界標準の分子動力学シミュレーションパッケージ「Amber」

～圧倒的なGPUパフォーマンスで、インシリコ創薬と構造生物学を加速～

【製品概要】



Amber (Assisted Model Building with Energy Refinement) は、世界中の研究機関の共同開発によって進化を続ける、生体高分子(タンパク質、核酸、糖鎖、脂質など)向けの分子動力学(MD)シミュレーションソフトウェア、および力場(Force Field)群の総称です。

業界標準の力場と、GPUに高度に最適化された計算エンジンにより、大規模な生体分子系の長時間のシミュレーションを現実的な時間で実行可能です。

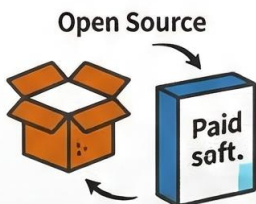
【メインコンテンツ】

選ばれる4つの特長



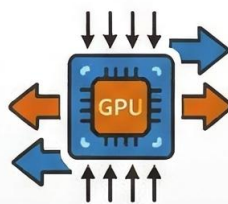
1. 「ソフトウェア」と「力場」の世界標準

Amberは強力な計算プログラム群であると同時に、分子の振る舞いを記述するパラメータセット「Amber力場」でもあります。この力場は極めて信頼性が高く、他のMDソフトウェアでも広く利用されるデファクトスタンダードです。



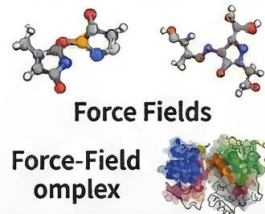
2. 目的で使い分ける2つのパッケージ構成

シミュレーションの準備や軌跡データの詳細な解析を行う強力な無償ツール群「AmberTools」と、高速なMDシミュレーションを実行するためのコア計算エンジン「Amber」を組み合わせて、効率的なワークフローを構築できます。



3. GPUに最適化された圧倒的な計算スピード

コアエンジン(pmemd.cuda)は、GPUの並列計算において極めて高いパフォーマンスを発揮するように専用設計されています。単一GPUから複数GPUノードまで強力にスケールし、計算時間を飛躍的に短縮します。



Force Fields
Force-Field complex

4. 高度で多彩なシミュレーション手法をサポート

標準的な分子動力学計算(NVE, NVT, NPT)に加え、熱力学的積分法(TI)、レプリカ交換MD(REMD)、さらには量子力学と分子力学を組み合わせたハイブリッド計算(QM/MM)など、高度な解析手法に対応しています。

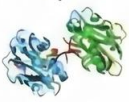
【サブコンテンツ: 主な対象分野とライセンス】

■ 主な対象分野・研究用途



構造生物学

タンパク質のフォールディング、構造変化、安定性の解析



創薬支援・インシリコ創薬

ターゲットタンパク質と薬物候補化合物の結合親和性予測、結合自由エネルギー計算



生体分子機能の解明

DNA/RNAの動的挙動、細胞膜・脂質二重膜のシミュレーション

■ パッケージとライセンスについて



解析・準備ツール「AmberTools」は無償(オープンソース)でご利用いただけます。



高速計算エンジン「Amber」は有償となります。

(※学術・非営利目的と商用利用でライセンス形態・費用が異なります。詳細はお問い合わせください)

アプライドがおすすめする解析専用ワークステーション

Amberの圧倒的なGPU計算パフォーマンス(pmemd.cuda)を最大限に引き出し、大規模な分子動力学シミュレーションを高速・安定して実行できる最適な専用ハードウェア環境をご提案いたします。



applied

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

CERVO Grasta Type-ALIS25WC-SI

生体高分子の動的振る舞いを高精度に予測する世界標準の分子動力学シミュレーションパッケージ「Amber」の動作環境をより快適に！



筐体	■ 4Uラックマウント対応 (レール：オプション)
基本ソフト	■ Ubuntu 22.04 インストール代行
プロセッサ	■ インテル® Xeon® w5-2545 プロセッサ - 3.5GHz to 4.5GHz TB4.7GHz (Single Core) - 12コア 24スレッド - 30MB Intel® Smart Cache - DDR5-4800
プロセッサ・クーラー	■ 簡易水冷プロセッサ・クーラー
メモリー	■ 128GB (32GB x4) - DDR5-5600 Registered-ECC - 8スロット (4ch) - 最大2TB (256GB x8 3DS RDIMM) ※ 動作速度はCPUに依存
ストレージ	■ 960GB M.2 NVMe-SSD 高耐久仕様 - PCI Express 4.0 (x4)
グラフィック	■ NVIDIA® A400 - 4GB GDDR6 - Mini DisplayPort : 4ポート - PCI Express 3.0 (x16形状/x8動作)
ネットワーク	■ [2ポート] 10ギガビット ■ [1ポート] 2.5ギガビット
ネットワーク (IPMI)	■ 非搭載
サウンド	■ 7.1ch オーディオ
電源ユニット	■ 1,200W/100V 1,500W/200V - 80 Plus Platinum 認証 - 100V 電源ケーブル
入力装置	■ 有線キーボード・マウス (USB接続)
保証	■ 3年間センドバック方式ハードウェア保証
ラック・マウント	■ 4Uラックマウント対応 ※ レールはオプション

標準構成価格 **オープン価格**

- ※ 本製品の仕様は、予告無しに変更となる場合があります。
- ※ 本製品には「Amber」は含まれておりません。



APPLIED HPC SOLUTION

その計算に、
妥協なき速度を。

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。