

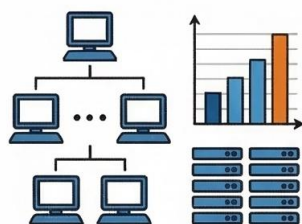
大規模生体分子システムの謎を解き明かす 超並列・高パフォーマンス分子動力学シミュレーション「NAMD」

～数百万原子レベルの巨大システムを、圧倒的なスピードで計算～

NAMD (Nanoscale Molecular Dynamics) は、米国イリノイ大学アーバナ・シャンペーン校 (UIUC) によって開発された、世界最高水準の分子動力学 (MD) シミュレーションソフトウェアです。

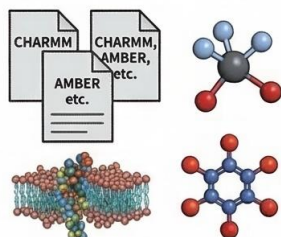
タンパク質、脂質、核酸といった大規模なバイオポリマーシステムをターゲットに設計されており、マルチコアCPUから最新のGPU、大規模スーパーコンピュータに至るまで、極めて高いスケーラビリティと計算パフォーマンスを発揮します。

選ばれる4つの特長



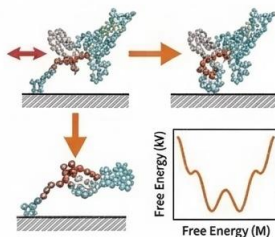
1. 圧倒的な並列パフォーマンスと拡張性

並列プログラミングモデル「Charm++」を基盤に設計。マルチコアワークステーションから、複数のGPU、数万コア規模の大規模クラスターまで、ハードウェアの性能を限界まで引き出し、現実的な時間で大規模解析を実現します。



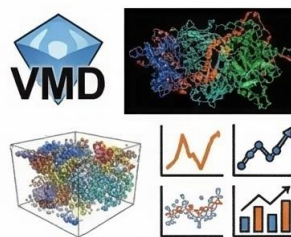
2. 業界標準の幅広い力場 (Force Field) を網羅

生体分子システムを極めて正確に記述・シミュレーションするため、CHARMM、AMBER、OPLS-AA、X-PLORといった主要な力場パラメータをフルサポートしています。



3. 高度で多彩なシミュレーション機能

標準的な平衡 MD (NVE, NVT, NPT) はもちろんのこと、分子に外力を加えるステアード分子動力学 (SMD) や、適応型バイアス力 (ABF) などを用いた高度な自由エネルギー計算に対応しています。



4. 可視化ソフト「VMD」とのシームレスな連携

同機関が開発する強力な可視化ソフトウェア「VMD」と密接に連携。直感的な入力ファイルのセットアップから、シミュレーション軌跡の高品質な3D可視化、詳細なデータ解析までを一貫して行えます。

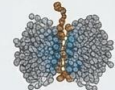
■ 主な対象分野・研究用途



構造生物学・生物物理学
タンパク質の構造変化、機能メカニズムの解明



創薬プロセス
ターゲットタンパク質と低分子化合物の結合シミュレーション



ナノテクノロジー
生体分子と人工ナノデバイスの相互作用解析

■ ライセンスについて



学術研究用途に限り、所定のライセンス条項に同意することで無償でダウンロード・ご利用が可能です。



(※商用利用のライセンスについては別途お問い合わせが必要です)

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

NAMDの卓越したGPU並列計算能力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。



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-HPC Type-A AMD Ryzen™ Threadripper™ NASI

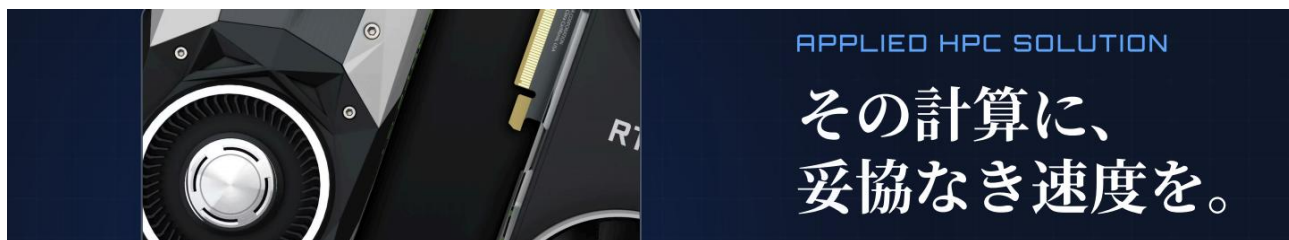
NAMDの卓越したGPU並列計算能力を最大限に引き出し、大規模な分子動力学シミュレーションを高速・安定して実行できる最適環境



筐体	■ タワー筐体
基本ソフト	■ Ubuntu 24.04 インストール代行
プロセッサー	■ AMD Ryzen™ Threadripper™ 9960X プロセッサー - 4.2GHz to 5.4GHz - 24コア 48スレッド - 128MB L3 Cache - 350w
チップセット	■ AMD TRX50 チップセット
プロセッサー・ファン	■ 簡易水冷CPUクーラー - 360mm High-Performance Liquid Cooling
メモリー	■ 128GB (32GB x4) - DDR5-5600 Registered ECC DIMM - 1.2V/2RANK
ストレージ	■ 1TB M.2 NVMe-SSD - R:7300MB/s - W:6300MB/s - PCIe 4.0
グラフィック	■ [1GPU] NVIDIA® RTX™ 5000 Ada 32GB-GDDR6 - DisplayPort x4 - PCIe4.0 (x16) - 12,800 コア
光学ドライブ	■ 非搭載
ネットワーク (無線)	■ [オンボード]10ギガビット(×1) - +2.5ギガビット(×1)
ネットワーク (IPMI)	■ WiFi 6E & Bluetooth 5.2
サウンド	■ 非搭載
電源ユニット	■ [オンボード] 7.1ch オーディオ ■ 1,200W/100V - 80 Plus Platinum - ATX3.0 - PCIe 5.0
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

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「NAMD」は含まれておりません。



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。