

分子動力学計算サーバ(Express5800/MD Server)の製品化

NECはこのたび、たんぱく質の特性分析などをコンピュータシミュレーションで行う場合に使用される分子動力学(Molecular Dynamics:MD)計算を高速に実行する分子動力学計算サーバ(Express5800/MD Server)を製品化し、2005年11月から販売を開始しました(写真1)。

分子動力学計算(以下MD計算)を行う場合には、対象とする物質を原子レベルでモデル化し、原子に働く相互作用力を、バネや静電気力のような簡単な力学モデルで近似し、それらの原子によって構成される分子の運動をコンピュータ上でシミュレーション(MD計算)することで、対象とする物質の構造や機能を予測する手法がとられています。しかしながら、たんぱく質のような巨大分子に対して構造や機能を正確に予測するためには、一般のPCサーバでは数日あるいは数ヶ月という膨大な計算時間がかかってしまいます。そのため、計算時間を短縮するためにはスーパーコンピュータやPCクラスターといった大規模なコンピュータシステムが必要になります。

NECでは、MD計算の大部分(多くの場合は99%以上)を占める原子間の非結合力の計算を高速に実行する専用のハードウェア「MDエンジン(写真2)」を新規に開発しMD Serverに搭載しました。MD Serverの主な特長は次のとおりです。

1)優れた計算性能

MD Serverの計算性能は一般のPCサーバ1台に比べて約250倍(計算条件:AMBER8、約30,000原子、孤立系、カットオフなし)。この性能比は、計算する原子数が多いほど大きくなります。

2)高精度な計算

飛躍的な計算性能の向上により、計算時間削減のためのカットオフ(遠距離原子間の非結合力を計算しない方法)を用いずに、分子全体のシミュレーションが可能となります。

3)IT運用コストの削減

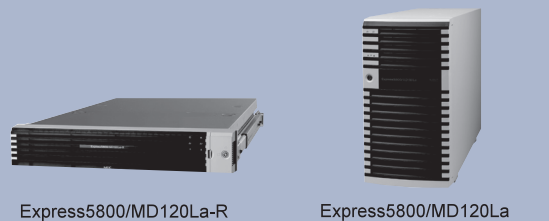
MD Serverは1台でPCクラスターのような大規模な計算システムと同等の計算性能を発揮するため、非常に高いコストパフォーマンスを実現しています。また、システム運用管理、消費電力、マシンルームの設置などのIT運用コストの面で非常に有効です。

4)業界標準のソフトウェアに対応

業界標準の分子動力学シミュレーションソフトAMBERをサポートしています。また専用のライブラリ関数を提供していますので、利用者独自の分子動力学コードの高速化も可能です。

問合せ先

NEC HPC販売推進本部
Tel:03-3798-9131
Mail:info@hpc.jp.nec.com



【サーバスペック】
計算エンジン: MDエンジン
CPU: Xeon3.80GHz×1~2
メモリ: 1GB~4GB
HDD: 73GB×2~73GB×6
サポートOS: Red Hat Enterprise Linux ES3/AS3(MD120La-Rのみ)
※OSおよびMDエンジン用ドライバはプリインストール出荷

写真1 Express5800/MD Server

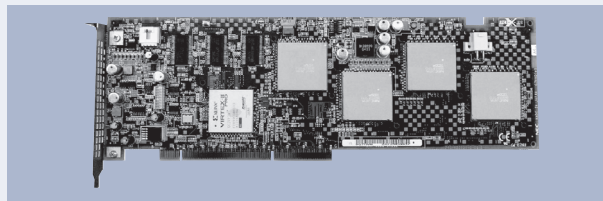


写真2 MD エンジン

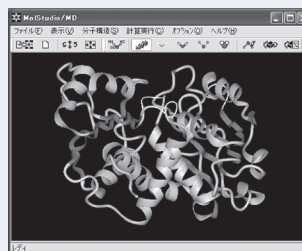


写真3 AMBER 専用 GUI

5)実行制御/可視化ツールなどの統合作業環境も充実
AMBERに対しては、専用のGUIツール(別売)が提供されます。PCなどのクライアントからMD Server上のコードを実行することや、計算結果を可視化することが可能です(写真3)。

新製品であるMD Serverは、これまで課題とされていた計算時間の短縮化と計算内容の高精度化を同時に実現し、バイオ分野での研究開発をより一層強力に支援するものです。