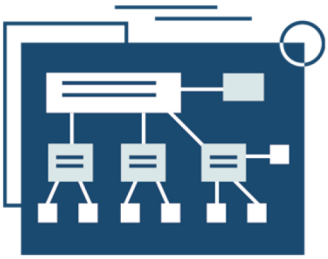
分子動力学計算ソフトウェア「GROMACS」向け HPC



GROMACSは並列計算を前提としたプログラミングがなされています。プログラムの大部分はC言語で記述されており、同じグループが以前に開発したGROMOS（FORTRAN 77ベース）が参考にされています。バージョン4.6時点において、SSEやAVX、HPC-ACEなどの拡張命令を用いたアセンブリ言語のルーチンが実装されており、高速な計算が可能となっております。

APPLID CERVO Grasta Type-IS2S-G-GM1

ソフトウェア	: GROMACS インストール代行
OS	: Ubuntu 20.04 LTS インストール代行
プロセッサー	: インテル® Xeon® Silver 4214R
メモリー	: 48GB（8GBx6） DDR4-2933 Registered-ECC
ストレージ	: 960GB M.2 NVMe-SSD +HDD 2TB
ネットワーク	: [2ポート] 10 ギガビット・イーサーネット
IPMI	: [1ポート] IPMI 2.0
グラフィック	: NVIDIA® GeForce RTX™ 3090 24GB-GDDR6x
電源ユニット	: 900W/100V | 80 Plus Gold 認証
保証	: 3年オンサイト保守/3年間センドバック方式 ハードウェア保証

Amberと同じ分子動力学計算ソフトですが、フリーウェアでありCPUやGPUの処理に特化しているため、同じ計算でも高速で演算できるアルゴリズムを持っています。それはAmberと異なり水分子に特化したアルゴリズムを用いていることと無関係ではありません。また、異なる力場のサポートによって非常に柔軟性が高いプログラムになっています。

そのため、Amberと異なりスレッド数が重要で論理プロセッサ数とGPUの数で計算速度が決まってきます。原子数が10000以上でGPUの加速効果が得られるのはAmberと同じです。MPIプロセス1個がGPU1枚に対応するように動作しているため、各MPIプロセスにおけるCPUスレッド数を増やすと使っているGPUの利用率が上がり、実行性能が向上します。

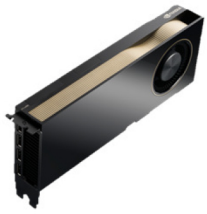
アプライド
Computer&Internet Audio&Visual
アプライド株式会社
理化学ATKチーム
TEL：06-6838-4123
E-mail：y-kinoshita@applied-net.co.jp

分子動力学計算ソフトウェア「GROMACS」向け HPC

APPLID CERVO Grasta Type-ES2S-G-GM1

ソフトウェア	: GROMACS インストール代行
OS	: Ubuntu 20.04 LTS インストール代行
プロセッサー	: [2基] インテル® Xeon® Silver 4210R
メモリー	: 48GB（8GBx6） DDR4-2933 Registered-ECC
ストレージ	: 960GB M.2 NVMe-SSD+HDD 2TB
ネットワーク	: [2ポート] ギガビット・イーサーネット
IPMI	: [1ポート] IPMI 2.0（LANの１ポートと兼用）
グラフィック	: NVIDIA® Quadro RTX™ A6000 48GB-GDDR6
電源ユニット	: 1,000W/100V｜80 Plus Gold 認証
保証	: 3年オンサイト保守/3年間センドバック方式 ハードウェア保証

NVIDIA® Quadro RTX™ A6000



10752
CUDA コア

48GB
GDDR6

NVIDIA® RTX™ A6000は、NVIDIA Ampere™アーキテクチャと48GBのGDDR6 メモリを搭載したプロフェッショナル向けのウルトラハイエンドグラフィックスボードです。CUDAコア10752基と48GBの大容量メモリで、レンダリング、ビジュアリゼーションにおいて大規模なデータセットの利用を実現します。第2世代RT Coreを336基搭載し、Deep Learningやリアルタイムレイトレーシングにおいて独立したコアを使用します。

「Quantum Espresso + LAMMPS」向け HPC

APPLID CERVO Grasta Type-IS2S-G-QE1

ソフトウェア	: Quantum Espresso + LLAMMPS インストール代行
OS	: Ubuntu 20.04 LTS インストール代行
プロセッサー	: インテル® Xeon® Silver 4210R
メモリー	: 64GB（16GBx4） DDR4-2933 Registered-ECC
ストレージ	: 960GB M.2 NVMe-SSD+HDD 2TB
ネットワーク	: [2ポート] 10 ギガビット・イーサーネット
IPMI	: [1ポート] IPMI 2.0
グラフィック	: NVIDIA® GeForce RTX™3090 24GB-GDDR6x
電源ユニット	: 900W/100V｜80 Plus Gold 認証
保証	: 3年オンサイト保守/3年間センドバック方式 ハードウェア保証

アプライド Computer&Internet Audio&Visual

アプライド株式会社
理化学ATKチーム

TEL：06-6838-4123
E-mail：y-kinoshita@applied-net.co.jp