



◆myPresto* / MolDesk の機能を用いた、MolSpaceで実現可能な機能

- ・ 操作の基本は、マウスによる[選択]、コマンド[実行]、結果の[確認]のみ
- ・ 分子の編集（原子の付加、削除、置換など）
- ・ mol2 ファイル形式で記載された多様な原子集団のタンパク質ドッキング
- ・ docking score index 法の装備
- ・ 化合物の合成容易性の計算
- ・ 量子化学計算による原子電荷の計算

* myPresto は、AMED・経済産業省・NEDO の支援によって産業技術総合研究所等によって開発された、次世代天然科学技術研究組合のソフトウェアです。

◆ハードウェアスペック

OS	CentOS 6.6 x86_64
CPU	Xeon(R) E5-2690v3 プロセッサー x2(2.6GHz, 12 コア, 30MB) 2P/24Core
メモリ	64GB DDR4 SDRAM(2133MHz, ECC, Registered, 8GBx8)
HDD	1TB ハードディスクドライブ x4(SATA, 7,200rpm) 4TB(RAID5)実効容量約 3TB
GPU	NVIDIA Quadro K420 2GB
ネットワークポート	インテル(R) I218LM, I210AT 10/100/1000 (オンボード、リア 2 ポート)
ディスプレイ	HP Z23i プロフェッショナル液晶モニター(23 インチワイド)
消費電力	1125W 80PLUS GOLD 90%電源変換効率
ジョブスケジューラ	OpenLava 2.2-1
MPI 環境	MPICH 3.1.4
コンパイラ	Intel Fortran Compiler 133-15.0-1 g77 Fortran Compiler 3.4.6-19
リモート 接続環境	XRDP 0.6.1-2 X11VNC 0.9.13-8



◆お問い合わせ

ライフマティックス株式会社

〒101-0041 東京都千代田区神田須田町 2-25 GYB 秋葉原 3 階

TEL : 03-5403-5917 / MAIL : infra@lifematics.co.jp

