

CBRC Newsletter

<http://www.cbrc.jp>

W
I
N
T
E
R
2
0
0
6
14

転石苔を生ぜず



本野 千恵

Chie MOTONO

大規模計算チーム
研究員

転石苔を生ぜず、という諺があります。その解釈は、英と米で、時代で、または個人で異なる、と諸説あります。研究分野が大きく移ってきた私には、時に気に懸かる諺です。

CBRC入所以前、私は、生化学系のタンパク質の実験をしていました。それだけでは全く言い訳にならない程、入所時の私の計算機に関する知識と技術は、お話にならないものでした。意識が低い、と言う方が正しい気もします。PCの電源を入れる度にちょっと緊張する、という調子でした。

CBRCは、クラスタシステムをはじめ素晴らしい計算環境を有しています。私も計算機実験による研究が行えるようになりましたが、贅沢な計算資源に甘え、何も気にせず使えるのが理想の計算機と思っていました。

タンパク質の分子動力学(MD)

計算による研究が中心となってきた私は、昨年度からCBRC BlueProteinシステムと呼ぶ超並列計算機(商品名 BlueGene)の導入に携わりました。8192プロセッサ構成で22.9TFLOPSの理論最大性能を持つ私達のCBRC BlueProteinシステムは、最小でも64プロセッサ単位の並列計算を扱う仕様で、生体高分子のMD計算には最適です。

調達時から導入後の現在まで、この仕事は、私には分からないことばかりでした。それでも、計算機に造詣の深い同僚やチーム長のおかげで、システム構成の決定から並列処理のチューニングまで理解を進めてきました。何より駆動力となったのは、この計算能力を持つことで初めて可能となる研究があると意識したことです。大量に処理して迅速に社会に提供できなければ意味のないもの、従来よりも

広くタンパク質分子の構造を探索しなくては見えてこない病変—現在、MD計算を利用したタンパク質の予測立体構造の精密化や疾病関連タンパク質の構造変化、タンパク質と化合物とのドッキング等の研究が、CBRC BlueProteinシステムをベースに、数名により進行中です。

計算機は動けば良いと考えていた私が、研究内容に適した超並列計算機を最適な状態で使用することを意識できたのは、優れた研究者達の間を揉まれて転がってきた結果です。良い意味で、苔を落とす力が、様々な分野からの人々が集うCBRCにはあるのでしょうか。

ここでしか出来ない、ここでなら存分にできる規模と水準の研究をしたい、という意気込みを共有する方が、お一人でも多く、CBRCで研究することを考えてみて下さるよう、願っています。

P.1
エッセー

P.2
トピックス
国際シンポジウム

P.3
研究紹介
(池田(和))

P.4
研究員紹介・お知らせ