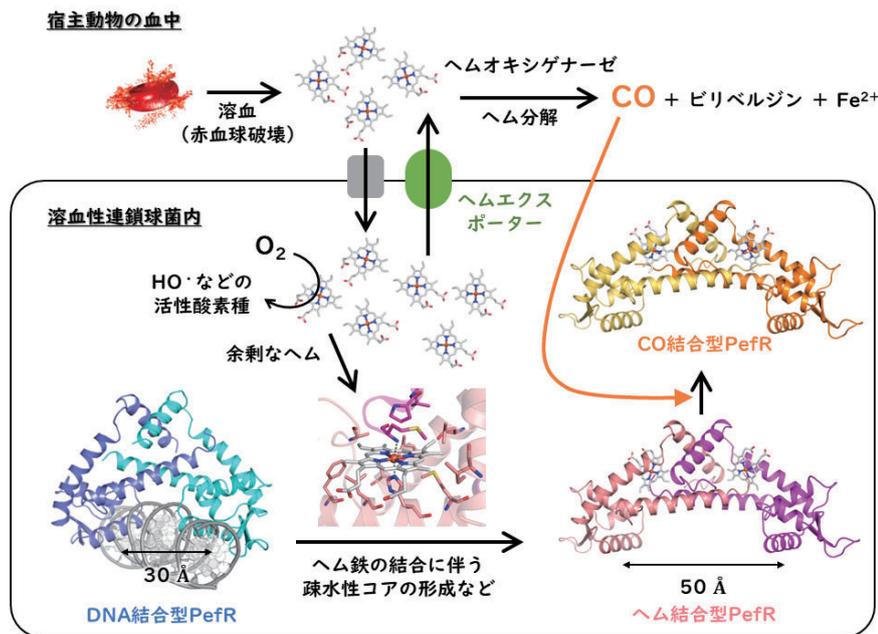


が知られている^[3]。したがって、ヘムを感知（結合）して標的DNAから解離したPefRは細胞質中に遊離しており、ヘム分解産物であるCOが菌体内に入ってきた時にCOを安定に結合して捕捉する役割も担える可能性を提案した。

本稿の内容は、兵庫県立大学大学院

理学研究科の城 宜嗣先生の研究室で助教をしていた頃の研究成果です。この研究は、所属研究室だけでなく、生命・錯体分子科学研究領域の青野 重利先生との「共同利用研究」により精力的に進めることができました。城先生、青野先生をはじめ、多くの共同研究者の

先生方と学生さん達に心から感謝申し上げます。私は十数年前に青野先生の研究室の博士研究員だった経緯もあり、本研究では共同利用研究として色々な実験装置を使用させていただきました。所内に理解のある共同研究者がいる場合は円滑に共同利用研究を進められると思いますが、そうでない場合はどこに何を持ち掛ければよいのか少し不安な感じもします。共同利用研究の素晴らしさや利用方法がもっと広く知れ渡り、たくさんの研究者が分子研を訪れ、より多くの輝かしい研究成果が分子研から発信されるように期待するとともに、私も継続的に利用させていただきたいと考えております。今後もよろしくお願ひ申し上げます。



X線結晶構造解析により明らかにしたDNA結合型・ヘム結合型・CO結合型のPefRの立体構造をそれぞれ青色と水色、ピンク色とマゼンタ色、黄色とオレンジ色のリボン図で描いている。DNA領域とヘムは灰色で示している。PefRが菌体内で遊離している余剰なヘムを結合すると、ヘム周辺の構造変化をトリガーとしてDNA結合部位の距離や配向が変化してDNAに結合できない構造に変化する。ヘムを結合したPefRはCOを安定に結合する性質も備えていることも明らかにした。

参考文献

- [1] T. A. Rouault (2004) *Science* **305**, 1577-1578.
- [2] M. Nishinaga, H. Sugimoto, Y. Nishitani, S. Nagai, S. Nagatoishi, N. Muraki, T. Tosha, K. Tsumoto, S. Aono, Y. Shiro, H. Sawai (2021) *Commun. Biol.* **4**, 467.
- [3] A. Wilks, M. Ikeda-Saito (2014) *Acc. Chem. Res.* **47**, 2291-2298.



さわい・ひとみ
博士（理学）を取得後、2006年より分子科学研究所にて博士研究員、日本学術振興会特別研究員、特任助教、2013年より兵庫県立大学大学院生命理学研究科にて助教、2022年5月より長崎大学大学院工学研究科の准教授として着任。生体内の鉄の動態と機能について、鉄イオンの感知・輸送・貯蔵・利用に関わる種々のタンパク質が相互に働く仕組みを、分子にとどまらず細胞組織のレベルでも解明することを目指して研究を展開している。

施設だより	<h2 style="margin: 0;">高性能分子シミュレータの更新</h2> <p style="margin: 0;">計算科学研究センター 岩橋 建輔</p>
-------	---

最初にお詫びしなければならないのは、2022年12月1日に予定していた高性能分子シミュレータの運用開始が2023年2月上旬となってしまいました

た。運用再開を待たれていたユーザーの方々には心からお詫び申し上げます(写真1)。
今回の調達ではこれまでにない問題

に直面しました。既設の冷却塔を再利用するか同じ場所に作り直す工事を行うため、異例の2か月の運用停止期間を設けました。また、物不足による納期が遅れ

る場合の想定も入札前に初めて行いました。一方、既存の大容量ストレージの老朽化のため、2か月しか再リースできない状態のため、納期の遅れが運用停止期間の増大に直結してしまいました。また、次世代のCPUやGPUの導入も時期的に不可能となりました。

新システムの概要ですが、運用期間は6年で、CPUはAMD 7763を採用し、通常の演算ノード804台、大容量メモリ搭載ノード14台、NVIDIA Tesla A100をノード当たり8台搭載したGPUノード16台を導入しました。CPUのコア数は旧システムの約2.6倍の106,752コア、共有ストレージの容量は14.8 PBとなっています。また、ノード間接続はInfiniBandとなっています。共有ストレージのI/Oの負荷を少なくするため、ローカルの一時保存領域として1.5 TBのNVMe SSDストレージを初めて導入しました。

CPUはAMD製のCPUが導入されましたが、入札前の段階ではIntel製のCPUと互角で最後まで我々でもどちらになるか予測できませんでした。これまでの仕様書ではCPUの性能の指標として1秒間あたりの浮動小数演算数(FLOPS)が用いられていましたが、この指標を使うとAVX512命令のあるIntel製のCPUが明らかに優位になるた

め、それぞれのCPUに最適化された分子動力学シミュレーションプログラムGromacsのベンチマーク結果を性能の指標としました。しかし、CPUが高性能でも消費電力が多ければ設備の問題で導入できませんし、電気代に直結するため、省電力のシステムであることも重要視しました。その結果、電力面で優位なAMD製のCPUで空調設備を使わない完全密閉型の水冷式システムとなりました。

今回の更新で時間がかかることが予想されたのはユーザーのデータの移行でした。今回は前回の移行時と比べて、ファイル数は10倍、容量は3倍という状態でした。2017年10月からの5年間の増加をグラフにしたものが図1と図2です。大容量ストレージで使われているLustreファイルシステムは多くの細かいファイルを扱うのが苦手であるため、運用停止後、各ユーザーのデータをアーカイブ化して高速にデータを転送することで、移行に要する時間の短縮を図りました。

計算科学研究センターの利用者数は1200人弱、グループ数は約280グループで、それぞれ過去最大を更新しています。これはすぐに使える豊富なライブラ



写真1 2022年11月現在、架台のみで演算ノードは未設置。

リアプリケーションがあるのと使いやすいという点が分子科学コミュニティに認められているためと思っています。計算科学研究センターではユーザー目線に立ち、システム運用、ユーザーサポート、アプリケーション導入を行ってまいりますので、今後とも計算科学研究センターの利用をお願いします。

最後に高騰する電気代への対応についてです。4月にはキロワット時間あたりの単価が20円台でしたが11月には27円台になり、今後さらに高くなりそうです。新システムは旧システムと比べて電力が6%ほど減る見込みですが、電力単価がさらに上がった場合は来年度以降一部ノードの停止も検討せざるを得ない状況となっていますので、電力単価が下がるのを願うばかりです。

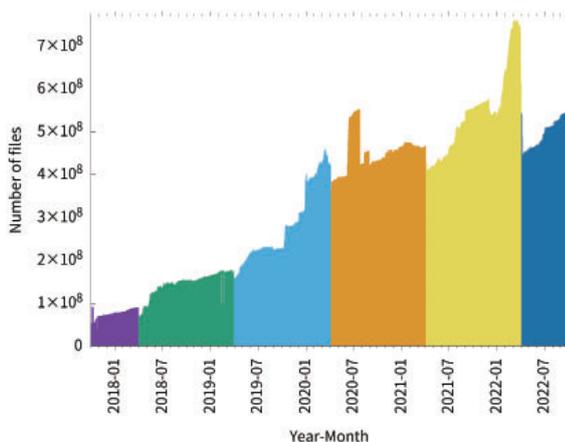


図1 過去5年間の全ユーザーのファイル数。

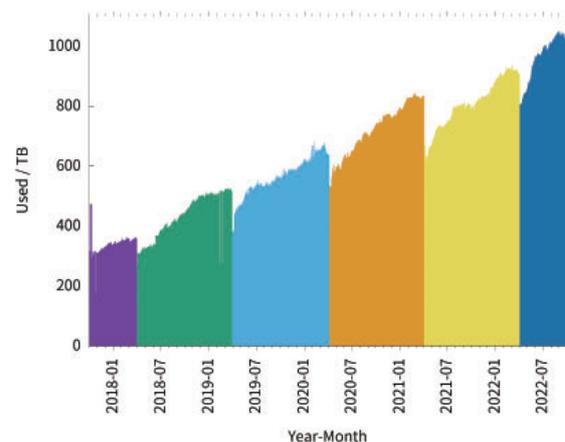


図2 過去5年間の全ユーザーのファイル容量。