

課題番号	GR082
------	-------

**先端研究助成基金助成金(最先端・次世代研究開発支援プログラム)  
実施状況報告書(平成25年度)**

本様式の内容は一般に公表されます

研究課題名	価格性能比と消費電力効率を極限まで追求した超並列計算機システムの実用化に関する研究
研究機関・ 部局・職名	長崎大学・先端計算研究センター・准教授
氏名	濱田 剛

1. 当該年度の研究目的

<p>&lt;&lt;平成25年度&gt;&gt;</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>これまでに GPU 型スパコン DEGIMA-2 システムのプロトタイプシステムを完成させ、GPU を 20 台まで高密度に接続可能なシステムボードを完成させた。そして、このシステムボードを 40 台並列に接続した最終システムを完成させる。</li> <li>DEGIMA-2 システムのターゲットアプリケーションである創薬ソフトウェアを開発する。高解像度 X 線結晶構造で得られた蛋白質データをもとに化合物結合部位の同定を行い、同定にはフラグメント分子軌道法(Fragment Molecular Orbital method: FMO 法)を用いる。そして、化合物結合部位を同定した蛋白質に結合する薬剤候補化合物を東京大学化合物ライブラリーの中から総当りで見つけ出すインシリコスクリーニングと呼ばれるソフトウェア ND(Nagasaki Docking)を開発する。</li> <li>ND ソフトウェアを用いてインシリコスクリーニングを行った化合物に対し、In Vitro(インビトロ)実験を行う。In Vitro とは化合物の薬剤活性を調べるために試験管内で行う生化学的実験のことである。</li> <li>次に ND ソフトウェアを用いたインシリコスクリーニングを行った化合物で In Vitro 実験によりさらなる化合物の絞り込みを行い In Vivo 実験を行う。In Vivo 実験とは In Vitro と同じように化合物の薬剤活性を調べる実験であるが、実験動物を用いた実験であるところが In Vitro と異なる。上記 1.~4.を完了し、インシリコスクリーニングを 3 日以内・電力 65kW 以内で完了させる。</li> </ol>
--

2. 研究の実施状況

<p>独自に設計を行った GPU スイッチボードを 40 台並列接続し、合計 320GPU を高密度に実装した DEGIMA-2 システムを完成させた。そして、創薬用アプリケーション・プログラムを開発し、以下のインシリコ(in silico)スクリーニングを実施した。</p> <p>まず、in silico スクリーニングはプリオン感染症、カンジダ症、HTLV-1 感染症の 3 つのターゲットに絞り実施した。プリオン病は in vivo まで、その他については in vitro までを実施した。</p> <p>HTLV-1 感染症については、ウイルス感染した細胞を効率的に傷害する細胞として <math>\gamma</math> <math>\delta</math> 型 T 細胞や NK 細胞を in vitro で用いた。<math>\gamma</math> <math>\delta</math> 型 T 細胞およびヘルパーNK 細胞を低分子化合物および IL-2/IL-18 で増殖誘導し、HTLV-1 感染細胞の除去を目指した。</p> <p>創薬プロセスとしては次のような手順で行った。まず、DEGIMA-2 を用い <math>\gamma</math> <math>\delta</math> 型 T 細胞受容体の in silico スクリーニングを行いヒット化合物を同定した。次に、大型 HTS 機器を用いて2次スクリーニングを実施し</p>
---

様式19 別紙1

た。具体的には、化合物希釈装置、化合物分注装置、細胞分注装置、In Cell Analyzer、 $\mu$  Cell、Thermal Shift Assay 装置などを用いた。

インシリコスクリーニングを用いて創薬プロセスで明らかになったことは、DEGIMA-2を用いるとin silicoスクリーニングに要する計算時間は3日間と十分な計算速度であることが確認された。また、必要な電力は65kWと十分に省電力であることが確認された。上記創薬プロセス全体で要した時間が約3ヶ月であることを考慮すると、in silicoスクリーニング側で化合物コンフォメーション数の増加を行ったり、計算アルゴリズム自体をより高負荷であるが高精度のものを採用するような改善の余地が残っていることも明らかになった。具体的には計算時間を現在の3日間から1ヶ月程度まで増やすような高負荷で高精度なアルゴリズムを採用できることが明らかになった。また、化合物の調達に要する時間が全体の大部分を占めることが問題点として明らかになった。これは複数のターゲット疾患に対し間隔を置かず流れ作業で計算することで改善する予定である。

3. 研究発表等

<p>雑誌論文 計 5 件</p>	<p>(掲載済み一査読有り) 計 3 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. P. Berczik, R. Spurzem, S. Zhong, L. Wang, K. Nitadori, <b>T. Hamada</b>, “Up to 700k GPU Cores, Kepler, and the Exascale Future for Simulations of Star Clusters Around Black Holes”, A. Veles, ISC Lecture Notes in Computer Science, Springer, 13-25, 2013</li> <li>2. C. Ling, T. <b>Hamada</b>, J. Bai, X. Li, D. Chesters, W. Zheng, W. Shi, “MrBayes tgMC3: A Tight GPU Implementation of MrBayes”, PLOS ONE, 10.1371/journal.pone.0060667, 2013</li> <li>3. L. Benedicic, F. Cruz, <b>T. Hamada</b>, “A GRASS GIS parallel module for radio-propagation predictions”, International Journal of Geographical Information Science, vol. 28-4, 799-823, 2014</li> </ol> <p>(掲載済み一査読無し) 計 0 件</p> <p>(未掲載) 計 2 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. C. Ling, D. Chester, A. Luo, <b>T. Hamada</b>, Design and Implementation of using graphics processors to accelerate MrBayes 3.2, PLOS ONE(in press)</li> <li>2. I. Omotuyi, <b>T. Hamada</b>,” Dynamical footprint of Falcipain-2 Catalytic Triad in Hemoglobin bound state”, Journal of Biomolecular Structure and Dynamics (accepted)</li> </ol>
<p>会議発表 計 2 件</p>	<p>専門家向け 計 2 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. “in silico screening on DEGIMA supercomputer”, T. Hamada, Asian Pacific Prion Symposium, 2013, July, Nagasaki, (招待講演).</li> <li>2. “An in silico screening that runs entirely on the GPU processor”, F. Cruz, T.Hamada, Drug Discovery and Therapy World Congress 2013, 2013, June, Boston.</li> </ol> <p>一般向け 計 0 件</p>
<p>図書 計 0 件</p>	

様式19 別紙1

<p>産業財産権 出願・取得状 況  計0件</p>	<p>(取得済み) 計0件  (出願中) 計0件</p>
<p>Webページ (URL)</p>	<p>長崎大学先端計算研究センター ホームページ <a href="http://nacc.nagasaki-u.ac.jp/">http://nacc.nagasaki-u.ac.jp/</a></p>
<p>国民との科 学・技術対話 の実施状況</p>	<p>標題:最先端研究開発支援プログラムの公開活動「FIRST シンポジウム『科学技術が拓く2030年』へのシナリオ」参加(パネルディスカッション「先進研究が花開く2030年」においてパネリストとして討論に参加) 実施日:H26.2.28~3.1 場所:東京(ベルサール新宿グランド) 対象者:大学・研究機関の研究者、企業関係者、学生、一般 参加者:1400人 内容:2030年に向けて生じる数多くの社会的課題を解決するため、近年、研究成果を社会に還元する取り組みが強く求められています。FIRST や NEXT での取り組みを振り返り、研究成果の社会還元をこれまで以上に促進するための研究開発マネジメント、研究開発体制、研究費制度、研究機関・企業・国等の科学技術関係機関の役割分担などについて、パネルディスカッション「先進研究が花開く2030年」においてパネリストとして討論に参加した。</p>
<p>新聞・一般雑 誌等掲載 計0件</p>	
<p>その他</p>	

4. その他特記事項

## 実施状況報告書(平成25年度) 助成金の執行状況

本様式の内容は一般に公表されず

## 1. 助成金の受領状況(累計)

(単位:円)

	①交付決定額	②既受領額 (前年度迄の 累計)	③当該年度受 領額	④(=①-②- ③)未受領額	既返還額(前 年度迄の累 計)
直接経費	128,000,000	82,750,000	45,250,000	0	0
間接経費	38,400,000	24,825,000	13,575,000	0	0
合計	166,400,000	107,575,000	58,825,000	0	0

## 2. 当該年度の収支状況

(単位:円)

	①前年度未執 行額	②当該年度受 領額	③当該年度受 取利息等額 (未収利息を除 く)	④(=①+②+ ③)当該年度 合計収入	⑤当該年度執 行額	⑥(=④-⑤) 当該年度未執 行額	当該年度返還 額
直接経費	5,700,615	45,250,000	0	50,950,615	50,849,362	101,253	0
間接経費	19,763,230	13,575,000	0	33,338,230	33,338,230	0	0
合計	25,463,845	58,825,000	0	84,288,845	84,187,592	101,253	0

## 3. 当該年度の執行額内訳

(単位:円)

	金額	備考
物品費	39,793,669	GPU型スパコンDEGIMA-2システム開発関連物品費等
旅費	2,451,439	DDTWC2013出席旅費(米国)等
謝金・人件費等	4,393,149	非常勤職員(研究補助員)人件費等
その他	4,211,105	接続試験費等
直接経費計	50,849,362	
間接経費計	33,338,230	
合計	84,187,592	

## 4. 当該年度の主な購入物品(1品又は1組若しくは1式の価格が50万円以上のもの)

物品名	仕様・型・性能 等	数量	単価 (単位:円)	金額 (単位:円)	納入 年月日	設置研究機関 名
Myria Screen II		1	3,517,500	3,517,500	2014/3/19	長崎大学