

## 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) 実績報告書

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. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

2. 収支の状況

(単位:円)

	交付決定額	交付を受けた額	利息等収入額	収入額合計	執行額	未執行額	既返還額
直接経費	128,000,000	128,000,000	0	128,000,000	127,898,747	101,253	0
間接経費	38,400,000	38,400,000	0	38,400,000	38,400,000	0	0
合計	166,400,000	166,400,000	0	166,400,000	166,298,747	101,253	0

3. 執行額内訳

(単位:円)

費目	平成22年度	平成23年度	平成24年度	平成25年度	合計
物品費		5,344,400	48,113,166	39,793,669	93,251,235
旅費	77,380	3,573,446	3,676,114	2,451,439	9,778,379
謝金・人件費等		3,593,112	2,583,197	4,393,149	10,569,458
その他		1,255,048	8,833,522	4,211,105	14,299,675
直接経費計	77,380	13,766,006	63,205,999	50,849,362	127,898,747
間接経費計	30,000	1,892,865	3,138,905	33,338,230	38,400,000
合計	107,380	15,658,871	66,344,904	84,187,592	166,298,747

4. 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
Infinibandスイッチ	MIS5025Q-1SFC	2	698,800	1,397,600	2011/4/15	長崎大学
coDEGIMAホート初期製造	株式会社イーツ リーズ・ジャパン	1	889,350	889,350	2012/11/26	長崎大学
coDEGIMAホート追加製造	株式会社イーツ リーズ・ジャパン	1	705,600	705,600	2012/11/26	長崎大学
DEGIMA-2筐体 両端筐体	株式会社イーツ リーズ・ジャパン	2	588,000	1,176,000	2013/1/13	長崎大学
アナログ(2ch)+DSI	アジレント・テクノロジー株式会社 U8903A-115	1	1,408,050	1,408,050	2013/3/26	長崎大学
Myria Screen II		1	3,517,500	3,517,500	2014/3/19	長崎大学

5. 研究成果の概要

現在医薬品の輸入が急速に拡大しており、輸入超過額は2011年に1兆3660億円まで上昇し、日本の貿易赤字(2.5兆円・平成24年)の隠れた主役となっている。現在の公的医療保険制度の維持が近い将来困難になることが予想でき、そのためにも新薬開発を低コスト・短期間で完了する計算機創薬の実用化が望まれる。本課題では、GPUを高密度に実装したDEGIMA-2を開発し、感染症創薬に応用した。DEGIMA-2は65kWの超低電力で3日以内に創薬計算を完了する。DEGIMA-2の研究成果は計算機創薬の実用化を早め、我が国の医療問題の解決に大きく貢献することが期待される。

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) 研究成果報告書

本様式の内容は一般に公表されます
------------------

研究課題名 (下段英語表記)	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
	Developing an Energy-Efficient and Cost Effective High Performance Computing System
研究機関・部局・職名 (下段英語表記)	長崎大学・先端計算研究センター・准教授
	Nagasaki University, Advanced Computing Center, Associate Professor
氏名 (下段英語表記)	濱田 剛
	Tsuyoshi Hamada

### 研究成果の概要

(和文):

現在、医薬品の輸入が急速に拡大している。新薬開発で欧米の後手に回り、海外から高額な抗がん剤などを輸入しているためである。輸入超過額は2011年には10年前の5倍の1兆3660億円で、日本の貿易赤字(2.5兆円)の隠れた主役となっている。40兆円規模に膨らんだ日本の医療費を支える税金と保険料は海外に流れているのが現状であり、このままでは高額療養費制度をはじめ公的医療保険制度の維持が困難になる。本研究課題では低コスト・省エネスパコンDEGIMA-2を開発し、創薬に応用することで新規薬剤を短期間・低コストで可能にする技術を確認した。

(英文):

We have developed an energy-efficient and cost-effective supercomputer, DEGIMA-2. DEGIMA-2 was designed for developing drugs. Developing drugs needs long term experiences by trial and error and Using DEGIMA-2, we can develop new drugs in a short period and with low cost than before.

1. 執行金額 166,298,747 円  
(うち、直接経費 127,898,747 円、間接経費 38,400,000 円)

2. 研究実施期間 平成23年2月10日～平成26年3月31日

3. 研究目的

現在、医薬品の輸入が急速に拡大している。新薬開発で欧米の後手に回り、海外から高額な抗がん剤などを輸入しているためである。輸入超過額は2011年には10年前の5倍の1兆3660億円で、日本の貿易赤字(2.5兆円)の隠れた主役となっている。40兆円規模に膨らんだ日本の医療費を支える税金と保険料は海外に流れているのが現状であり、このままでは高額療養費制度をはじめ公的医療保険制度の維持が困難になることが予想される。新規薬剤開発は長期に渡る試験と巨額な開発費用を要することが問題となっている。また、医学・薬学・工学等の分野横断的な連携チームが必要なチャレンジングな課題でもある。本研究課題では低コスト・省エネスパコン DEGIMA-2 を開発し、DEGIMA-2 スーパーコンピュータを使った新たな薬剤開発プロセスの有効性を確認し、これまでよりも短期間・低コストで新薬開発が実現可能であることを実証した。このようなインシリコ創薬技術を実用化することで我が国の省エネ・スパコン技術(グリーン・イノベーション)のみならず、健康医療・創薬(ライフ・イノベーション)へも波及効果をもたらすことが本研究の目的である。

4. 研究計画・方法

本研究は、超低消費電力・低コストスパコン DEGIMA-2 を開発し、インシリコ創薬に応用した。

(1) まず、最初に大量に用いて超低消費電力・低コストスパコンを実現させるために GPU を用いたハードウェアを設計した。設計に先立ち、既存の部品のみを組み合わせたプロトタイプハードウェアを完成させた。これは、世界省エネスパコンランキング GREEN500 に登録し、世界第3位(国内1位)となり、アーキテクチャ・コンセプトの妥当性を実証することができた。

(2) 次に、プロトタイプハードウェアの改良点をまとめ、さらなる省エネルギー・低コスト化に向けて、独自ハードウェアの設計・製造を開始した。具体的には、GPU を高密度に実装するための専用ネットワークボードを開発した。

(3) ハードウェアの開発と前後するが、プロトタイプシステムを用い、応用アプリケーション・ソフトウェアの開発を同時並行して行った。ハードウェアシステムの低コスト化のためには、アプリケーションにやや特化してハードウェアを設計することが消費電力・コストの両面で有効であるため、この時期にはいくつかの波及効果の高いアプリケーションを取捨選択することを

った。最終的には創薬応用ソフトウェアに開発時間を優先的に割り振ることに重点を置いた。また、専用ハードウェアの設計に関しても、創薬応用ソフトウェアが最低限高速に動作するために必要な条件(特に GPU 間ネットワークバンド幅)を絞り込むことでハードウェアの開発コスト・量産コスト・消費電力を下げることをねらった。

- (4) そして、計画の最終段階では DEGIMA-2 スーパーコンピュータを用いた新規薬剤開発を開始した。まず、創薬ターゲットはプリオン感染症、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。HTLV-1 感染症については、ウィルス感染した細胞を効率的に傷害する細胞として  $\gamma\delta$  型 T 細胞や NK 細胞を *in vitro* で用いた。 $\gamma\delta$  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。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  $\gamma\delta$  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。インシリコ創薬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。

#### 5. 研究成果・波及効果

本研究プロジェクトでは超低消費電力・低価格型スパコン DEGIMA-2 を開発しインシリコ創薬に応用した。本研究プロジェクトの成果は以下の通りである。

- (1) 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、世界省エネスパコンランキング GREEN500 において 1.380Mflops/W の性能を記録し**世界第 3 位(国内1位)**に認定された。GPU を用いたスパコンの省エネ性能の有効性を実証した。
- (2) GPU 間を高密度に接続可能なネットワークボードを開発した。このネットワークボードを並列に接続した最終システム DEGIMA-2 を完成させた。
- (3) 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した。東京大学化合物ライブラリー等のデータベースの構築も行った。
- (4) 創薬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*・*In Vivo* プロセスを構築した。

#### 波及効果

現在、医薬品の輸入が急速に拡大している。新薬開発で欧米の後手に回り、海外から高額な抗がん剤などを輸入しているためである。輸入超過額は2011年には10年前の5倍の1兆3660億円で、日本の貿易赤字(2.5兆円)の隠れた主役となっている。40兆円規模に膨らんだ日本の

## 様式21

医療費を支える税金と保険料は海外に流れているのが現状であり、このままでは高額療養費制度をはじめ公的医療保険制度の維持が困難になる。本研究課題で得られた経験は他の新薬開発においても低コスト・短期間で実現できる可能性があり、我が国の省エネスパコン技術の向上のみならず、医療技術の促進にも貢献することが期待される。

6. 研究発表等

雑誌論文  計 14 件	<p>(掲載済み一査読有り) 計 10 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>① T. Narumi, <b>T. Hamada</b>, K. Nitadori, R. Sakamaki, K. Yasuoka, “Fast quasi double-precision method with single-precision hardware to accelerate scientific applications”, International Journal of Computational Methods, 8, 561 (2011)</li> <li>② Lei Liu, Guillermo Marcus Martinez, Peter Berczik, Tsuyoshi Hamada, Ingo Berentzen, Andreas Kugel, Reinhard Männer, Robi Banerjee, Ralf Klessen, Rainer Spurzem: Astrophysical SPH Simulations with raceSPH Library. CSE 2011: 595–601</li> <li>③ Rio Yokota, Jaydeep P. Bardhan, Matthew G. Knepley, Lorena A. Barba, <b>Tsuyoshi Hamada</b>: Biomolecular electrostatics using a fast multipole BEM on up to 512 gpus and a billion unknowns. Computer Physics Communications 182(6): 1272–1283 (2011)</li> <li>④ Rainer Spurzem, Peter Berczik, Ingo Berentzen, Keigo Nitadori, <b>Tsuyoshi Hamada</b>, Guillermo Marcus Martinez, Andreas Kugel, Reinhard Männer, J. Fiestas, Robi Banerjee, Ralf Klessen: Astrophysical particle simulations with large custom GPU clusters on three continents. Computer Science – R&amp;D 26(3-4): 145–151 (2011)</li> <li>⑤ MrBayes tgMC3: A Tight GPU Implementation of MrBayes, C. Ling, <b>T. Hamada</b>, J. Bai, X. Li, D. Chesters, W. Zheng, W. Shi : PLoS ONE 8(4): e60667., 2012</li> <li>⑥ Up to 700k GPU cores, Kepler, and the Exascale future for simulations of star clusters around black holes, P. Berczik, R. Spurzem, S. Zhong, L. Wang, K. Nitadori, <b>T. Hamada</b>, A. Veles, Lecture Notes in Computer Science Volume 7905, Springer, 2013, pp 13–25</li> <li>⑦ 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>⑧ C. Ling, <b>T. 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>⑨ 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> <li>⑩ I. Omotuyi, <b>T. Hamada</b>, “Dynamical footprint of Falcipain-2 Catalytic Triad in Hemoglobin bound state”, J Biomol Struct Dyn 2014 Jun 19.:1–10.</li> </ol> <p>(掲載済み一査読無し) 計 3 件</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>① 五十嵐翔一, 森田竜平, 奥山祐市, <b>濱田 剛</b>, 北道淳司, 黒田研一, “移植が容易な PCI Express インターフェイスフレームワークの設計と実装”, 信学技報, vol. 111, no. 31, RECONF2011-8, pp. 43–48, 2011.</li> <li>② 村崎 誠, <b>濱田 剛</b>, Felipe A. Cruz. “DEGIMA における LINPACK 電力性能評価”, 情報処理学会 第 191 回 計算機アーキテクチャ研究発表会, 2011</li> </ol>
--------------------	---

	<p>③ Y. Iida, Y. Fujii, T. Azumi, N. Nishio, S. Kato, <u>T. Hamada</u>, S. Kagami, N. Kawaguchi, and K. Takeda. "Prototyping Commodity ICT for Mobility CPS", In the 1st IEEE International Conference on Cyber-Physical Systems, Networks, and Applications (CPSNA'13), WiP Session, 2012.</p> <p>(未掲載・査読有) 計 1 件</p> <p>① C. Ling, D. Chester, A. Luo, <u>T. Hamada</u>, Design and Implementation of using graphics processors to accelerate MrBayes 3.2, PLOS ONE(in press)</p>
<p>会議発表 計 9 件</p>	<p>専門家向け 計 6 件</p> <p>① 平成 24 年 3 月 27 日 3rd ICCS Manycore and Accelerator-based High-performance Scientific Computing Workshop 招待講演, "How to build a cost-efficient supercomputer?", <u>Tsuyoshi Hamada</u></p> <p>② 平成 24 年 3 月 28 日 3rd ICCS Manycore and Accelerator-based High-performance Scientific Computing Workshop 一般講演発表, "Multi-Scale Physics Simulations on Large GPU Clusters", Felipe A. Cruz, <u>Tsuyoshi Hamada</u></p> <p>③ 平成 24 年 3 月 28 日 情報処理学会 第 191 回計算機アーキテクチャ研究発表会 招待講演, "DEGIMA における LINPACK 電力性能評価", <u>濱田 剛</u></p> <p>④ The greenest accelerator-based supercomputer in the TOP500 list, T. Hamada, International Workshop on Highly-Efficient Accelerators and Reconfigurable Technologies (HEART2012), 2012.5.31-6.1, Okinawa</p> <p>⑤ "in silico screening on DEGIMA supercomputer", <u>T. Hamada</u>, Asian Pacific Prion Symposium, 2013, July, Nagasaki, (招待講演).</p> <p>⑥ "An in silico screening that runs entirely on the GPU processor", F. Cruz, <u>T.Hamada</u>, Drug Discovery and Therapy World Congress 2013, 2013, June, Boston.</p> <p>一般向け 計 3 件</p> <p>① 平成 23 年 5 月 10 日 日本船舶海洋工学会 西部支部構造研究会 招待講演, "長崎大学における GPU 型スパコン DEGIMA への取り組み", <u>濱田 剛</u></p> <p>② 平成 23 年 10 月 22 日 長崎大学耳鼻咽喉科同門会総会 招待講演, "長崎大学におけるエコなスパコン DEGIMA の紹介", <u>濱田 剛</u></p> <p>③ Technology exchange: Supercomputing and Embedded computing, F. Cruz, <u>T. Hamada</u>, Cool Chips XV, 2012.4.18-20, Yokohama</p>
<p>図書 計 1 件</p>	<p>① High-Performance Computing Using FPGAs, <u>T. Hamada</u>, Y. Shibata, Springer; 2013, 367-388, ISBN-13: 978-1461417903</p>

様式21

<p>産業財産権 出願・取得 状況</p> <p>計0件</p>	<p>(取得済み) 計0件</p> <p>(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HP「The DEGIMA」 <a href="http://nacc.nagasaki-u.ac.jp/">http://nacc.nagasaki-u.ac.jp/</a> The International Center for Computational Science (ICCS)HP「News」 <a href="http://iccs.lbl.gov/">http://iccs.lbl.gov/</a></p>
<p>国民との科 学・技術対 話の実施状 況</p>	<p>① 日本船舶海洋工学会 西部支部構造研究会 招待講演(H23.5.10, 長崎市)</p> <p>② Kennesaw State University (米・ジョージア州立大学機構)訪問団 DEGIMA 見学会(H23.5.12, 長崎大学)</p> <p>③ 全国同時七夕講演会(一般向け)(H23.7.6, 長崎大学)</p> <p>④ 「未来の科学者発掘プロジェクト“サイエンス塾”」において長崎県内の一般小学生を対象としたスパコン見学会の実施(小学生向け)(平成23年8月25日, 長崎大学)</p> <p>⑤ DEGIMA 一般見学会, H24.4.6, H24.4.24, H24.5.1(計3回), 長崎大学, 一般市民対象</p> <p>⑥ 長崎大学オープンキャンパスにおける DEGIMA 見学会, H24.7.21, 長崎大学, 高校生等対象</p> <p>⑦ 特別講演会「宇宙の成り立ちをスーパーコンピュータで探る」, H24.10.31, 名古屋商科大学, 学生及び一般市民対象</p> <p>⑧ 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)</p> <p>実施日:H26.2.28~3.1</p> <p>場所:東京(ベルサール新宿グランド)</p> <p>対象者:大学・研究機関の研究者、企業関係者、学生、一般</p> <p>参加者:1400人</p> <p>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4件</p>	<p>① 長崎新聞, H23. 2. 23 朝刊, P20, 「次世代研究開発支援プログラム長崎大の2件採択 スパコンと腫瘍解析」</p> <p>② 日経エレクトロニクス(H23. 4. 18号), p53, 「特集・市場の変化が転機に・長崎大学の濱田氏」</p> <p>③ 太田出版「ケトル」vol.1 June. 2011, p135, 「オフィスひとつにつき1台持ちの時代がやってくる!? 世界一安いスパコン」</p> <p>④ 朝日新聞, H23. 7. 2, P30, 「長崎大スパコン3位 省エネ性能・世界ランク」</p>

## 様式21

その他	<ul style="list-style-type: none"><li>○ 長崎市特別表彰（個人の部）（H23. 4. 1 受賞）</li><li>○ 長崎市特別表彰（団体の部）（H23. 4. 1 受賞）</li><li>○ The PRACE Award 2011（H23. 6. 20 受賞）</li><li>○ 世界スパコン省エネランキング GREEN500 世界第3位（国内1位）（H23. 6 受賞）</li><li>○ TV 報道：KTN『スーパ - Gopan』生出演、「長大スパコン DEGIMA 省エネで世界3位」(H23. 7. 11)</li><li>○ TV 報道：NBC『報道センター』, 「長崎大学開発のスパコン 快挙！ 省エネ性能世界3位。スパコン開発にかける情熱」(H23. 12. 12)</li></ul>
-----	--

### 7. その他特記事項

なし