

最先端・次世代研究開発支援プログラム
事後評価書

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

【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。

【総合評価】

<input type="checkbox"/>	特に優れた成果が得られている
<input type="checkbox"/>	優れた成果が得られている
<input type="radio"/>	一定の成果が得られている
<input type="checkbox"/>	十分な成果が得られていない

【所見】

① 総合所見

既存 GPU スパコンのシステム技術の改良、ソフトのパッケージ化やユーザーグループとの協調などに見るべきものがあり、高く評価できる。

事後報告書では技術的革新性について、結果として高いパフォーマンスの創出を示しているが、一方で、どのような工夫によって高性能なスパコンが低コストで実現可能なのか、に不明確さが残り、内容の革新性の正確な判断が難しい部分がある。また、ソフトウェアの新規性についても現状の GPU のソフトウェア技術に比べて、どのよ

うな新しい手法を創出したかが不明確である。

総合的に観ると、年次進行に伴って研究の重点が次世代 GPU 型スーパーコンピュータの研究開発から、出口戦略にシフトし、交付申請時の目的は一定の成果が得られたと考えられる。

② 目的の達成状況

・所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

革新的な GPU 型グリーンスパコンの開発自体が遅れており、順調とは言い難い。既開発の DEGIMA に改良を加えた GPU 型スパコンが消費電力当り 1.38Gflops/W を達成し、良好な成績 (GREEN500 の 2011 年 6 月版世界 3 位、2011 年 11 月版世界 6 位) を認定されている。しかしながら、2013 年 6 月版ではトップ (GPU 型スーパーコンピュータ) は既に消費電力当り倍以上の 3.2Gflops/W を達成しており、次世代 GPU 型スーパーコンピュータ DEGIMA-2 が所期の目的を達成する根拠となる基本構成方式・スペックが明確に述べられていない現段階では、期待はするが、所期の目的の達成がなされたとは言い難い。

③ 研究の成果

・これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が (ある ・ ない)

・ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が (創出された ・ 創出されなかった)

・当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

研究前半のスパコン省エネ化に対する取り組みの一つとして、DVFS (Dynamic Voltage and Frequency Scaling) の独自の方式を提案し、電圧・周波数を細粒度で調整を可能にした。DEGIMA システムの評価結果は、スパコン省エネ性能ランキングにおいて 2 期連続で国内第一位の省エネ性能を達成 (2011 年 6 月および 2011 年 11 月)。また、アクセラレータベースのスパコンとして世界で最も省エネ性能が優れているスパコンに認定された。これらはいずれも高く評価できる。さらに、3 千万化合物データをシステムに標準装備することで直ちに計算を開始できるようになっている他、創薬研究等において使い勝手に関しても洗練されており、優れた研究成果であると思われる。

GPU スパコンに関するパッケージ化の技術の開発やユーザーグループの育成の成果は、当初の目的の他の研究成果として評価できる。

④ 研究成果の効果

・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が

(見込まれる ・ 見込まれない)

・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が

(見込まれる ・ 見込まれない)

計算科学の分野を、裾野広く推進する効果大きい。さまざまな応用に対して、廉価に高性能計算の環境をハード・ソフト含めて構築した功績は認めてよい。

創薬や構造物計算、環境シミュレーションなど、多くの応用があり、期待される。

⑤ 研究実施マネジメントの状況

・適切なマネジメントが (行われた ・ 行われなかった)

すべて汎用技術を採用したグリーンスパコンであり、FPGA 設計や独自設計のプリント基板の工夫により DEGIMA からの質的向上の努力がなされた。本プロジェクトでは、半導体テクノロジー (プロセス) の進展が短期間で進む汎用技術を採用しているため、出口戦略の明確で適切な設定により、今後広範囲に広がる可能性を十分示したと判断でき、研究マネジメントは適切に行われたと判断される。

知的財産権の出願・取得が全く無いのは残念であるが、論文発表・会議発表の中で本システムの具体的適応性を十分示しており、社会への発信はなされていると判断できる。