

シノプシスと理化学研究所

シノプシスの ASIP Designer を用いて理研が分子動力学シミュレータ用カスタム・プロセッサを 6 ヶ月以内で開発

“ 今回の開発プロジェクトに与えられた期間は非常に厳しいものでしたが、シノプシス社の ASIP Designer を使えば我々の非常に特殊なアーキテクチャの実装が可能になると信じていました。ASIP Designer により、命令セットをチューンナップし、我々の特殊なアルゴリズムを既存のプロセッサよりも 30 倍高速に実行することが可能になりました。これにより、重要な生体分子の相互作用のシミュレーションに必要な計算時間を年単位から数週間単位へと大幅に短縮することができるのです ”

国立研究開発法人 理化学研究所 生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム チームリーダー
泰地 真弘人 (たいじ・まこと) 氏



企業紹介

国立研究開発法人 理化学研究所（以下、理研）は日本最大の総合研究所で、幅広い科学分野における高品質な研究に定評があります。1917年（大正6年）に東京で財団法人として創設された理研は、研究の規模と範囲を急速に拡張し、現在では日本全国に世界トップクラスの研究拠点のネットワークを巡らせています。理研の生命機能科学研究センター（BDR）は分子動力学シミュレーションを専門としており、そのシミュレーション用にベタ FLOPS 性能を誇る第4世代の強力な高性能計算（HPC）システム「MDGRAPE-4」を開発しました。

課題

- 分子動力学（MD）シミュレーションを高速に実行できる高性能な特定用途向け命令セット・プロセッサ（ASIP）コアを開発すること
- そのASIPを最短期間で開発すること
- 次世代HPCシステムの次バージョン「MDGRAPE-4A」の心臓部となるマルチコア・チップ1個に新しいASIPを最大17個統合すること

シノプシスのソリューション

- ASIP Designer

利点

- 大規模な分子動力学シミュレーション・アルゴリズムを既存のコアより30倍高速に実行する特定用途向けカスタム・プロセッサを開発
- ソフトウェア開発キット（SDK）と合成可能なRTLを自動生成する機能により、コンセプト・レベルからインプリメンテーションまでの開発工程を6ヶ月以内に完了
- 短期間でマルチコア・チップ1個にASIPを17個統合し、ASIP設計完了から数ヶ月以内にテーブルアウトを完了

概要

理研の創薬先端計算科学基盤ユニットは、大規模・高速スーパーコンピュータを利用した先端計算科学技術を駆使して分子シミュレーション技術を実現しています。これらの分子シミュレータを使用して原子レベルでの薬物の挙動を特定し、有効性と選択性の高い薬物候補になりうる有望化合物構造式の予測に役立てます。分子動力学（MD）シミュレーションでは大量の演算処理が発生するため、テラFLOPS級の処理性能が必要です。汎用プロセッサではこの性能を得られないと判断した理研は、シノプシスのASIP Designerを使用して専用のカスタム・プロセッサを独自開発することを決定し、1個のカスタム・マルチコア・チップにこのプロセッサを17個集積しました。

特定用途向けプロセッサの設計を効率化

シノプシスのASIP Designerでは、目標のプロセッサ・アーキテクチャ（命令セットとマイクロ・アーキテクチャの両方を含む）をユーザーが高い抽象度で指定します。このハイレベル記述に基づき、ASIP Designerはサイクル精度の命令セット・シミュレータ、アセンブラ、リンカ、デバッガ、C/C++コンパイラを含むSDKを自動生成します。SDKがただちに生成されるため、理研は独自のCアプリケーション・コードをコンパイルして実行し、性能をすぐに評価することができました。この「コンパイラ・イン・ザ・ループ」方式は、アーキテクチャ最適化を効率的に検討する上で重要な役割を果たしました。理研はまず、ASIP Designerに付属する多数のサンプル・デザインから1つを選び、このシンプルなスカラー・プロセッサ・アーキテクチャをベースに、データ・レベル並列性（SIMD）と特殊命令を追加してさまざまなカスタマイズを行いました。この特殊命令には、スカラーおよびベクター実行ユニットの両方に対する固定小数点演算など特別なビットおよび算術演算の他、性能と効率を最大化する特殊データパスも含まれます。こうして完成したアーキテクチャは、理研が内製したシミュレーション・アルゴリズムに高度に特化しながらもC言語による完全なプログラミングが可能で、ソフトウェア開発者は最適化済みのASIPアーキテクチャを基に開発を進めることができます。

また、理研はプロセッサの合成可能なRTLを生成するASIP Designerの機能およびそれに付随する検証サポートも利用しました。

このプロセッサ・コアの設計は、コンセプト・レベルから最終RTLまでが6ヶ月以内に完了しました。今回のプロジェクト成功を受け、理研の設計チームは次世代HPCシステムにも引き続きASIP Designerを採用したいと考えています。

“ 理研の分子動力学シミュレータに必要な性能は、既製の商用プロセッサでは得ることができませんでした。シノプシス社のASIP DesignerにはSDKの自動生成機能があり、反復型の設計アプローチが可能のため、これらのシミュレーションを高速に実行するカスタム・プロセッサの開発を6ヶ月以内で完了できました ”

国立研究開発法人 理化学研究所 生命機能科学研究センター 計算分子設計研究チーム チームリーダー
泰地 真弘 氏

SYNOPSYS[®]

日本シノプシス合同会社

〒158-0094 東京都世田谷区玉川2-21-1 ニ子玉川ライズ オフィス TEL.03-6746-3500(代) FAX.03-6746-3535
〒531-0072 大阪府大阪市北区豊崎3-19-3 ピアスタワー13F TEL.06-6359-8139(代) FAX.06-6359-8149