

Synopsys公司和RIKEN公司

RIKEN公司利用Synopsys公司的ASIP Designer工具在不到六个月内开发出用于分子动力学仿真计算的定制处理器

“我们深信，Synopsys公司的ASIP Designer工具将使我们能够在紧张的项目周期内完成实现我们的定制架构。它使我们能够优化指令集，以比现有处理器快30倍的速度运行我们的特定算法，这极大地缩短了我们模拟重要的生物分子相互作用所需要的计算时间 – 把该时间从一年缩短到几周。”

~Makoto Taiji博士, RIKEN公司生物系统动力学研究中心团队负责人



业务

RIKEN公司是日本规模最大的综合性研究机构，以在多学科领域的高质量研究而闻名。RIKEN公司成立于1917年，当时是东京一家私营研究机构，后来其规模和范围不断快速扩张，目前已经在日本各地设立了众多世界级研究中心和机构。RIKEN公司的生物系统动力学研究中心专注于模拟分子动力学，为此开发出了MDGRAPE-4系统，这是其第四代强大的高性能计算 (HPC) 系统，具有每秒千万亿次浮点运算 (petaflops) 的计算性能。

挑战

- 开发一款高性能面向特定应用的定制处理器 (ASIP)，以加快分子动力学 (MD) 算法仿真的执行速度
- 缩短其ASIP的开发时间
- 集成多达17个此定制处理器到一个多核芯片中，该芯片将成为其下一代MDGRAPE-4A HPC系统的核心部件

Synopsys解决方案

- ASIP Designer

优势

- 开发专用的定制处理器，能够以比现有处理器快30倍的速度执行大规模分子动力学仿真算法
- 软件开发工具包 (SDK) 和可综合的RTL代码的自动生成，这使得RIKEN公司能够在不到6个月内完成从概念到实现的全部设计工作
- 把17个此ASIP快速集成到一个多核芯片中，并在ASIP设计完成后的几个月内成功流片

概述

RIKEN公司负责药物发现分子模拟平台的团队，借助于专门为分子模拟技术设计的大规模、高速超级计算机，并使用了领先的计算技术，尤其是其分子仿真技术。这些分子仿真技术用于在原子层次上识别药物的特性，并帮助预测哪些化学配方能够成为有效的药物候选。分子动力学(MD)仿真是一项计算密集型的工作，它需要每秒千万亿次浮点运算的处理性能。RIKEN公司发现，通用处理器无法提供其所需要的性能，因此，该公司决定利用Synopsys公司的ASIP Designer工具来开发其自己的专用定制处理器，并把17个该处理器集成到一个定制的多核芯片中。

高效的面向特定应用的处理器设计

Synopsys公司的ASIP Designer让用户在高层次上指定所需要的处理器架构(包括指令集和微架构)。基于这种高级描述，ASIP Designer能够自动配置出一套SDK，其中包含一个周期精确指令集仿真器、汇编器、链接器、调试器和C/C++编译器。该SDK的即时可用性使得RIKEN能够快速编译并运行其专有的C应用程序代码，以便确定性能。这种“Compiler-In-The-Loop”的方法是高效探索架构优化方向的关键因素。RIKEN从ASIP Designer提供的众多设计示例中的某一个开始入手。基于一套简单的标量处理器架构，RIKEN通过添加数据级并行(SIMD)和专用指令来进行各种定制。这些专用指令为标量及矢量执行单元提供了专门的位运算和算术运算(例如定点运算)，而且还定制了专用的数据通路，以实现性能和效率的最大化。由此产生的架构虽然高度特定于RIKEN公司的内部模拟算法，但仍然完全采用C语言编程，从而使得软件开发人员能够轻松利用该ASIP的架构优化的特点，开发软件代码。

RIKEN公司同时使用ASIP Designer生成该处理器的可综合RTL代码以及附带的验证环境。

RIKEN公司在不到六个月的时间内完成了该处理器器的设计，实现了从概念到最终RTL的整个过程。随着这个项目的圆满结束，RIKEN设计团队正期待继续把ASIP Designer用于其下一代HPC系统。

“就我们的分子动力学仿真器而言，我们需要目前市面上的处理器所无法提供的性能。Synopsys公司ASIP Designer的自动SDK生成功能为我们提供了一套快速迭代的设计方法，能够让我们在不到六个月内开发出一款定制的处理器，从而大大提高了算法仿真速度。”

~Makoto Taiji博士，RIKEN公司生物系统动力学研究中心团队负责人