

令和 5 年 6 月 12 日現在

機関番号：82401

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19H01107

研究課題名（和文）次世代分子動力学シミュレーション専用計算機の基盤開発

研究課題名（英文）A basic development of the next-generation special-purpose computer system for molecular dynamics simulations

研究代表者

泰地 真弘人 (Taiji, Makoto)

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・チームリーダー

研究者番号：10242025

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 34,400,000円

研究成果の概要（和文）：次世代の分子動力学シミュレーション専用計算機MDGRAPE-5の基礎開発を行った。各要素の一層のハードウェア化を進め、それらのDeep Integrationによる高性能実現が目標である。結合力計算・粗視化MD向けの専用命令を持ち、複数スレッドを時分割で並列実行するSIMD汎用コア、汎用コア・非結合力計算パイプラインをイベント検出に基づき高効率稼働させるイベント駆動回路を新規に設計した。設計は全てChisel言語を用いて行い、パラメタ指定によって回路構成を容易に変更可能である。非結合力計算パイプライン・メモリ・オンチップネットワークなどの設計も行い、次世代システムオンチップの基盤を完成させた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

汎用プロセッサ・専用パイプライン・メモリ・ネットワークが相互に強く依存した“Deeply Integrated”システムの開発は、D. E. Shaw researchと我々のグループのみで行われており、独自性が高い。このようなシステム構成は、専用パイプラインの構成や精度などの面では特殊性が高いが、他のアプリケーションに対する専用化においても通用する一般性がある。現在多くのアプリケーションで強スケーリング性能の向上が求められており、本開発で行う同期機構・メモリ構造などが応用可能である。また、本開発で進めたパラメタ化された専用回路構成技術は深層学習向けプロセッサなどに広い応用を持つ。

研究成果の概要（英文）：We have conducted basic development of MDGRAPE-5, a next-generation special-purpose computer for molecular dynamics simulations. The goal is to achieve high performance through deep integration of each element implemented as hardware. A SIMD general-purpose core with dedicated instructions for bonded force calculation and coarse-grained MD, which executes multiple threads in parallel in a time-division manner, and an event-driven circuit that operates the general-purpose core and nonbonded force calculation pipeline efficiently based on event detection were newly designed. The entire design was done using the Chisel language, and the circuit configuration can be easily changed by specifying parameters. We also designed the nonbonded force computation pipeline, memory, on-chip network, and other components to complete the foundation of the next-generation System-on-Chip.

研究分野：計算機科学 計算生物学

キーワード：専用計算機 分子動力学計算 高性能計算 コデザイン システムオンチップ

1. 研究開始当初の背景

分子動力学 (Molecular Dynamics, 以下 MD) シミュレーションは、物質を構成する原子に働く力を古典的な力として近似し、Newton の運動方程式を計算機により数値的に解くことによって原子の軌跡を求め、これから物理量を求める手法である。MD シミュレーションは物性科学から生命科学まで広い範囲で応用されている汎用的な手法であるが、中でも、生命科学・創薬研究は MD シミュレーションの最も重要な応用領域の一つである。実験的に観測が難しいタンパク質の動的な振る舞いの研究や、溶液中でタンパク質が取りうる種々の構造のサンプリングのために、MD シミュレーションが活用されている。

こうした生体高分子のダイナミクスは階層的で長い時間スケールを持ち、最も重要な大規模な構造変化は通常数マイクロ秒～数ミリ秒以上で起こるため、長時間のシミュレーション・大規模なサンプリングが必須である。計算の観点からタンパク質の MD シミュレーションを見ると、必要とするステップ数は多いが、1 ステップあたりの計算量は小さいことが特徴である。典型的なタンパク質の系では、周囲の溶媒を含めた原子数は 10 万原子以下となることが多い。並列汎用計算機では 100 原子/コア程度で性能が飽和してしまうため、現在の大規模並列計算機を持つ数万～数百万以上の高い並列度を活用できない。MD シミュレーションは問題規模を保ったまま性能を向上させる「強スケーリング性能」が必要な問題の典型であり、科学計算の中でも最も早くこの障壁に到達した問題の一つである。

我々のグループでは、MD シミュレーションの計算速度を改善するために、専用計算機 MDGRAPE の開発を行ってきた。MDGRAPE では、非結合力の計算を高速に行う演算パイプラインの専用化を中心とした開発を行い、世界で最初に 1PFLOPS のピーク性能を達成した MDGRAPE-3 を完成させるなどの成果を上げた。しかし一方では、並列度の上昇によりネットワークやその他同期コストが性能向上のボトルネックになり、強スケーリング性能では汎用計算機と変わらない状況になってきていた。その後、米国 D. E. Shaw research において MDGRAPE 同様の専用パイプラインに、ネットワークや汎用プロセッサ部を含めて高度に最適化を行った Anton が開発され、汎用計算機に比べ 1,000 倍の性能を達成した。我々のグループでもこれらの統合を行ったシステム MDGRAPE-4A を完成させ、汎用計算機の 5 倍の性能を達成した。

我々は MDGRAPE-4A や Anton のように、複数の演算要素やメモリ、ネットワークなどを密結合させたプロセッサを”Deeply Integrated Processor”と呼んでいる。今後ポストムーア時代において、シリコンデバイスを用いて計算機の性能を向上させるためには、専用化は必須であると考えられる。電力性能の観点からも、専用化により大きく削減が可能であり、同一プロセスでの比較では GPU の 10 倍以上の電力効率を達成している。MD シミュレーションの他にも、近年ではイジングスピン系のモンテカルロ・アニーリングシミュレーションが再興し、また深層学習やブロックチェーン等においても専用化が進んでいる。今後専用化の重要性はさらに増すと考えられ、そこでは、我々が進めている Deep Integration 手法が、システムの実行性能向上のために重要な役割を果たすと考えられる。

2. 研究の目的

本研究の目的は、次世代の MD シミュレーション専用計算機 MDGRAPE-5 に向け、各要素の一層のハードウェア化を進め、それらの Deep Integration を行ったプロセッサの基礎開発を行うことである。これにより、MD シミュレーションにおいては現在の性能をピーク性能面でも実行性能面でも 10 倍以上向上させ、同種の専用・準専用プロセッサの開発の基礎を築く。現行世

代 MDGRAPE-4A の性能ボトルネックを解析し、さらにハードウェアへの Deep Integration を進めることでボトルネックを解消する。

MDGRAPE-5 の目標としては、以下の性能設定している。

1. 64 チップのシステムで 10 万原子系の計算を 1 ステップ 5 マイクロ秒で実行
2. 電力性能 100GFLOPS/W 以上

性能目標としては現在のところ 12nm のプロセス技術の利用を想定しているが、研究開発自体は特定のプロセス技術に依存したものではなく、スケーラブルである。なお、電力性能については、専用化を進めると徐々に演算部以外の比重が高まる傾向があり、GFLOPS/W 値としては控えめである。

また、同期技術・メモリ周辺の最適化技術・ネットワーク技術を中心に、ポストムーア時代の専用・準専用システム開発の基盤としての一般化を図る。具体的には、極力設計をパラメトライズして再利用性を高める。

3. 研究の方法

MDGRAPE-5 SoC のハードウェア開発を論理回路シミュレーションおよび FPGA (Field Programmable Gate Array, 書き換え可能なゲートアレイ) レベルで進める。

(1) 現在の SoC に存在する性能ボトルネックを解明し、(2)その問題を解決するための設計指針を示し、(3) 優先順位をつけて詳細設計までを行う。

性能ボトルネックの解明については、MDGRAPE-4A 上でのソフトウェア・ハードウェアの性能評価を活用し、改善に向けた評価を行うこととした。なお、MDGRAPE-4A 向けソフトウェア開発については、本計画外で進めた。

詳細設計で用いるハードウェアの記述手法については、MDGRAPE-4A で用いた SystemVerilog と ASIP Designer(Synopsys 社)の利用を想定していたが、検討を進め Chisel 言語を用いることに変更した。Chisel は Scala 言語の上のドメイン特化言語(DSL)として実装されている新しいハードウェア記述言語である。Scala 言語の機能を用い、パラメタ化された設計を得意とする。また、オープンな RISC-V プロセッサ開発環境である Chipyard が Chisel 言語で書かれており、これを利用することができる。

4. 研究成果

まず、MDGRAPE-4A の性能上の問題点を洗い出し、それへの対処の方針を固めた。特に、汎用プロセッサ部の性能の問題が大きいことが示され、これに集中的に対応した。命令の実行効率が低く、ソフトウェアでイベントを検出し次の処理を駆動する手順に要するコストが大きいことが問題の中心であった。分子動力学シミュレーション専用計算システムで必要になる要素は以下である。

- ・ 結合力計算向け汎用コア
- ・ イベント駆動回路
- ・ 非結合力計算加速パイプライン
- ・ メモリ
- ・ オンチップネットワーク
- ・ 長距離力計算加速部
- ・ オフチップネットワーク

上記のうち、特に問題が大きかった「結合力計算向け汎用コア」「イベント駆動回路」の改善を中心に行った。以下に、設計成果の概要を示す。

(1) 結合力計算向け汎用コア (Bond Engine)の設計

Bond Engine は、特殊命令をもつプログラマブルなハイパースレッド対応プロセッサであり、3次元ベクトル処理向けのベクトルプロセッサ、結合力計算・粗視化モデル向けの特殊命令をもつスカラプロセッサからなる。このプロセッサはイベント処理回路と密接に結合しており、イベント処理回路からデータと演算指令のインジェクションを受け一連の計算を行い、結果をDMAコントローラ経由で創出する。当初計画には入っていなかった機能として、粗視化分子動力学計算に対応できるように設計を行った。設計の特徴は以下である。

- ・ FPUの段数 (デフォルト4段) に合わせた数のスレッドに順に命令を発行することで、Out of OrderなしにFPUを全段稼働させられる(Hyperthreading)。これにより、スループットを大きく向上できる。
 - ・ 分岐命令の条件チェックと分岐先アドレスの設定をスレッドの命令発行間隔に合わせることで、投機的実行なしに分岐によるストールを排除。
 - ・ 代表的な数学関数を実装：1/x, sqrt, 1/sqrt, sin, cos, acos, atan2, log, exp
- また、本プロセッサ用のアセンブラ言語を用意した。

(2) イベント駆動回路の設計

イベント駆動回路は、MD 計算処理の1ステップ内の各フェーズ間の依存関係、フェーズにより駆動されるモジュール処理、フェーズが依存するモジュール処理の設定に基づき、処理を駆動する。図1にイベント駆動処理の流れの概念図を示す。全体の計算を中粒度 (例えば一つの結合力計算、1セルペアに対する非結合力計算などを想定) の処理 (図中の"Sequece") に分解し、各処理間をイベントで繋いでいく形で1ステップの計算を記述する。

まず結合力計算の駆動回路の設計について述べる。結合力の計算は計算対象の粒子の組み合わせが多様で、必要な粒子情報が揃うタイミングは他ノードの処理・通信に依存して変動するため、粒子情報の受信を監視し、計算可能となった結合力計算から順次汎用コアへ要求するハードウェアを実装した。機能の概要は以下である。

- 1 結合力計算に必要な粒子データの受信を監視する
- 2 結合力毎に必要な粒子の受信状態を更新する
- 3 粒子が揃った結合力イベントを駆動する
- 4 駆動された結合力イベントに対応する計算関数・引数を渡して汎用コアを駆動する

このために、粒子番号からどの結合力に必要な粒子かを特定する回路、必要な粒子が揃った結合力イベントを駆動する回路、駆動されたイベントから汎用コアで実行する関数と引数を生成する回路などをなるべく汎用的な形で設計した。また、計算に必要な粒子データのローカルメモリ (キャッシュ) へのロード、計算結果のメモリへのストア・他ノード送信もイベント駆動回路内にハードウェア実装し、汎用コアは基本的には計算関数の実行のみ処理すればよいようになっている。

次に、非結合力計算加速専用パイプラインの駆動回路の設計について述べる。専用パイプラインは計算対象を空間分割したセルのペアで計算を行なう。セルはノード間に分散しており、結合

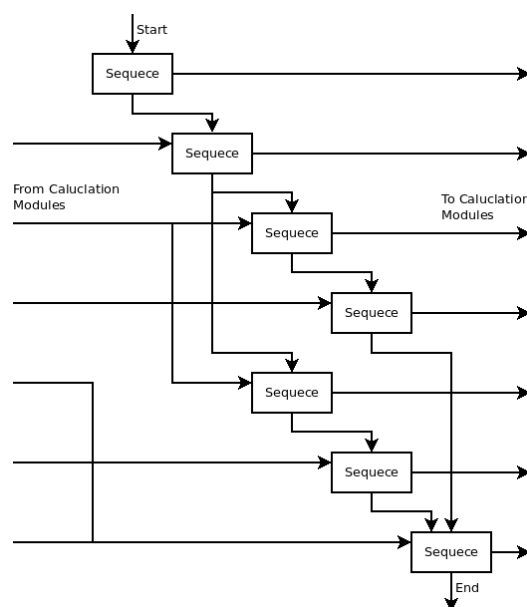


図1 イベント駆動処理の流れの概念図。Sequece はひとまとまりの処理。

力計算と同様に計算可能となるタイミングはロード負荷や通信で変動する。このため、セルの状態監視と通信、セルペアが揃ったときに計算を自動的に駆動するハードウェアを実装することで極力効率を上げるよう工夫した。本機能の概略は以下である。

- 1 セルの使用可能状態の通信
- 2 計算可能なセルペアを検出、ロード・計算を駆動
- 3 専用パイプラインのセルロード、ストア（計算結果）要求を実行する DMAC

(3) 非結合パイプラインの改良

非結合力計算加速パイプラインについては、MDGRAPE-4A の設計を踏襲しており、これを Chisel 言語で書き直した。MDGRAPE-4A では固定シーケンスで駆動していたが、本設計では上記のイベント駆動で説明したように、ダイナミック(out-of-order)に駆動している。そのため、パイプラインの粒子レジスタについては、キャッシュとして再設計を行った。

(4) メモリの改良

メモリについては、MDGRAPE-4A の設計を踏襲し、Chisel で再設計すると同時にパフォーマンスの改善を図った。メモリ側にセル管理機能、力などの積算機能を持たせることにより、複数プロセッサ間での同期コストを削減している。また粒子 ID からのアクセスを可能にする粒子管理機能を有し、アクセス遅延を削減している。

(5) Chiselを用いたライブラリ RIALへの機能追加

Chisel 言語で書かれた演算・論理ライブラリ RIAL (RIKEN Arithmetic and Logic library)の拡張を行った。具体的には以下の項目を実施した。分子動力学計算だけでなく、機械学習の加速に向けた機能も一部含まれる。

- ・ 浮動小数点積和演算器
- ・ 逆数・平方根・逆数平方根・三角関数・逆三角関数・指数関数・対数関数を含む特殊関数の実装・改良
- ・ 整数乱数から浮動小数点乱数への変換回路
 - 一様 [1, 2) の範囲に変換するもの
 - 一様 [0, 1) の範囲のあらゆるnormalized numberに変換するもの
 - 標準Gaussianに従う乱数に変換するもの
- ・ 数学関数モジュールが必要な関数のみをインスタンス化できるよう変更
- ・ Softplus関数の実装 (FP32, BF16)
- ・ Sigmoid関数の実装 (FP32, BF16)

(6) その他の開発

その他、シンプルなオンチップネットワークの開発を行った。また、チップ間のトーラスネットワーク Torus Interconnect Network (TIN)の開発を行ったが、MD シミュレーションに特化した部分（長距離力演算部）の開発については終えていない。ここまでの開発を取りまとめ、FPGA への実装試行を行った。

一部優先度から、当初計画で検討していた事項の内進められなかったものもあるが、重要な部分については予定よりかなり詳細な設計を完了させることができた。これらの開発を通じ、次世代の分子動力学計算専用機 MDGRAPE-5 の基盤開発をほぼ完了させることができた。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Morimoto Gentaro, Koyama Yohei M., Zhang Hao, Komatsu Teruhisa S., Ohno Yousuke, Nishida Keigo, Ohmura Itta, Koyama Hiroshi, Taiji Makoto	4. 巻 -
2. 論文標題 Hardware acceleration of tensor-structured multilevel ewald summation method on MDGRAPE-4A, a special-purpose computer system for molecular dynamics simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 SC '21: Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1145/3458817.3476190	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Teruhisa Komatsu, Noriaki Okimoto, Yohei M. KOYAMA, Yoshinori HIRANO, Gentaro MORIMOTO, Yousuke OHNO, Makoto Taiji	4. 巻 10,16986
2. 論文標題 Drug Binding Dynamics of the Dimeric SARS-CoV-2 Main Protease, Determined by Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.26434/chemrxiv.12332678.v1	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計9件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 森本 元太郎
2. 発表標題 MDGRAPE-4A: a special-purpose supercomputer for molecular dynamics simulations
3. 学会等名 RIKEN BDR Symposium 2021 “Structuring Biosystems: Functions Emerging from Molecules”
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 小松 輝久
2. 発表標題 Molecular dynamics study of the dimeric SARS-CoV-2 main protease with 7 HIV inhibitors
3. 学会等名 RIKEN BDR Symposium 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 泰地 真弘人
2. 発表標題 医薬を設計するための専用高性能RISC-Vコンピュータ
3. 学会等名 RISC-V Day Tokyo 2020 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 泰地 真弘人
2. 発表標題 RISC-V Dedicated High-Performance Computers for Designing Medicine
3. 学会等名 RISC-V Day Vietnam 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 泰地 真弘人
2. 発表標題 分子動力学シミュレーション専用計算機MDGRAPE-4Aの開発
3. 学会等名 第33回 回路とシステムワークショップ (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 泰地 真弘人
2. 発表標題 MDGRAPE-4A: A Special-purpose computer systems for Molecular Dynamics simulations
3. 学会等名 Supercomputing Frontiers Europe 2020 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 森本 元太郎
2. 発表標題 MDGRAPE-4A: A special-purpose computer for molecular dynamics simulations
3. 学会等名 Pioneering Project "Dynamic Structural Biology" 第3回研究報告会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 森本 元太郎
2. 発表標題 MDGRAPE-4Aシステムの運用と性能評価
3. 学会等名 CBI学会2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Morimoto Gentaro, Koyama Yohei M., Zhang Hao, Komatsu Teruhisa S., Ohno Yousuke, Nishida Keigo, Ohmura Itta, Koyama Hiroshi, Taiji Makoto
2. 発表標題 Hardware acceleration of tensor-structured multilevel ewald summation method on MDGRAPE-4A, a special-purpose computer system for molecular dynamics simulations
3. 学会等名 SC '21: the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	大野 洋介 (Ohno Yosuke) (00291914)	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・上級技師 (82401)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	小山 洋平 (Koyama Yohei) (10569817)	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・研究員 (82401)	
研究分担者	森本 元太郎 (Morimoto Gentaro) (60401220)	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・技師 (82401)	
研究分担者	小松 輝久 (Komatsu Teruhisa) (70348499)	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・研究員 (82401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関