



雪湖科技借 Alveo 打造分子动力学计算专用引擎加速新药研发

雪湖科技“Yaddle MD”在基于 FPGA 的 Alveo 加速卡上提供高性能分子动力学计算专用解决方案

公司简介

上海雪湖科技公司成立于 2017 年，是一家致力于高性能计算产品研发与解决方案的创新企业。该公司主要为生命科学、石油天然气勘探、自动驾驶、分布式存储和其他相关领域提供创新型专用高性能计算解决方案和产品。

行业：人工智能及高性能计算

总部：中国上海

成立时间：2017 年

<http://www.snowlake-tech.com/>

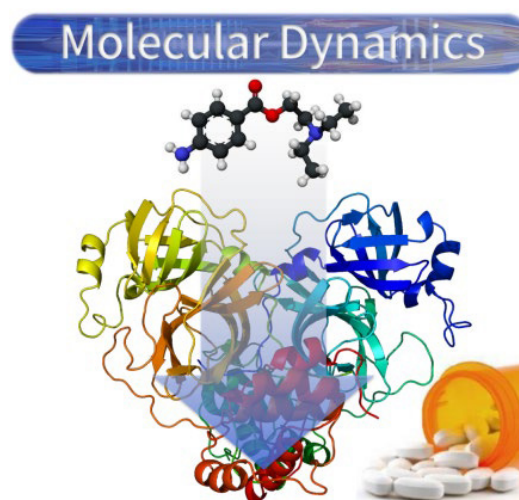


图 1 - 药物研究与发现过程中使用的分子动力学计算

项目概述

雪湖科技设计并研发的“Yaddle MD”是一个基于 FPGA 的分子动力学专用引擎。这是一种在赛灵思 Alveo™ 加速卡上实现的分子动力学计算专用解决方案，其借助赛灵思运行时库 (XRT) 通过分子动力学专用 API 为常用的分子动力学软件和其他分析插件提供兼容性支持。

相较于在 CPU 和 GPU 上运行，运行在 Alveo 上的 FPGA 分子动力学专用引擎 Yaddle MD，显著提高了性能，并将总拥有成本降低数倍。

行业挑战

近年来，传统的基于结构 (structure-based) 的设计方法已经逐渐达到其极限，使得用于药物研究和发现的资本开支呈指数级增长。因而，对于药物设计领域来说，基于运动 (motion-based) 的药物设计方案，即分子动力学模拟，堪称业界最激动人心也最具创新性的进步之一。而分子动力学模拟的实现，则对算力有极高的要求。

在过去，只有大型超级计算机才有能力为分子动力学计算提供足够的算力。但是致力于提供“专用超算”解决方案的雪湖科技，希望打破这个瓶颈，开发出一种比传统超级计算机性能更高而且成本更低、能效更高的解决方案。

解决方案

如上所述，为了促进医学的发展，药物研发已进步到分子层面。在这个层面上，科学家能够更加深入地理解分子和生物过程的作用，解开它们运动的奥秘。

Yaddle MD 是雪湖科技面向高性能分子动力学计算而基于 FPGA 专门打造的分子动力学计算专用引擎。该方案借助赛灵思基于 FPGA 的 Alveo U200 加速器卡实现了超高性能的 FPGA 分子动力学算法，能够执行非常复杂的计算。通过 Alveo 这一拥有自适应计算技术能力的板卡，Yaddle MD 基于单张 Alveo 卡就可实现比使用 CPU 和 GPU 处理器更高的性能，提供此前只有超级计算机才能提供的强大算力，从而大幅加速生物分子的动力学模拟速度。

借助 Yaddle MD，助力用户可以实现：

- 在单片 FPGA 上实现完整的分子动力学计算，从而释放大量 CPU 资源
- 实现原子间相互作用的分布式流水线计算，显著提高计算性能
- 编码原子之间的键合信息，并在实时计算过程中对其进行解码
- 通过工具集为常用的分子动力学软件和其他分析工具（包括格式转换）提供兼容性支持

赛灵思 Alveo 加速器卡专为满足瞬息万变的现代数据中心需求而设计，面向机器学习推断、视频转码、数据库搜索和分析等常见工作负载，可提供比 CPU 高达 90 倍的性能。

由于复杂算法演进的速度已经远远超越了芯片的设计周期，因此功能固定的 GPU 和 ASIC 器件无法跟上发展节奏。基于赛灵思 16nm UltraScale™ 架构而构建的 Alveo 加速器卡，提供了独特的可重配置加速功能，不仅能够灵活适应算法的持续优化，而且还能在支持任意类型工作负载的同时，降低总拥有成本。

设计成效

从性能上看，雪湖科技 Yaddle MD FPGA 分子动力学专用引擎运行在 Alveo 加速器卡上，比仅用 CPU 的分子动力学软件方案高近 50 倍，比使用 GPU 加速的分子动力学软件方案高两倍，如图 2 所示。与此同时，FPGA 的功耗仅为 CPU 的 2/3，GPU 的 2/9，为此使得 Yaddle MD 每度电可以提供的模拟量是 CPU 的近 100 倍，GPU 的近 10 倍。

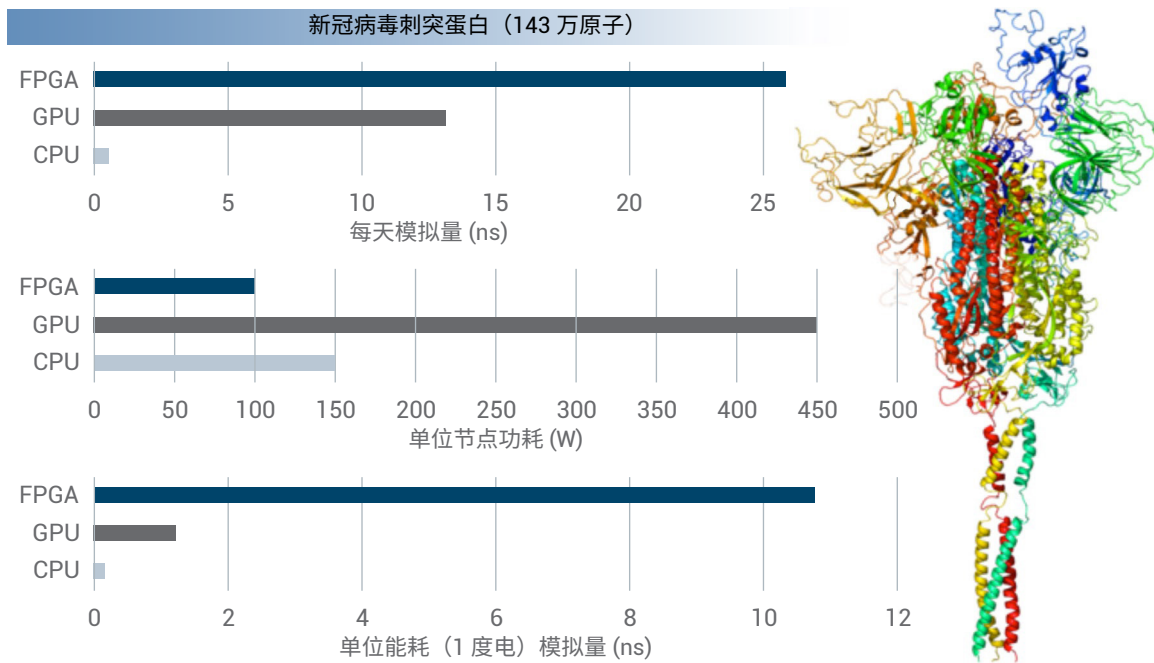


图 2 - 雪湖科技 Yaddle MD FPGA 分子动力学专用引擎与竞争解决方案相比，性能更高且能耗更低

雪湖科技生命科学计算首席科学家盛楠博士表示：“就像破案时‘看监控录像’远比‘看现场照片’要容易捕捉作案细节一样，分子动力学模拟让药物设计人员更直接的‘看到’药物分子的整个生效过程，从而大幅提高新药研发的成功率。高性能是确保分子动力学计算高效和精准的关键，雪湖科技基于 Alveo 的高性能分子动力学专用引擎，不仅能为客户节省大量时间成本，而且让基于动力学的药物设计由不可能变为可能”。

目前，雪湖科技的 Yaddle MD 引擎已经开始通过阿里云提供 MD 加速服务，其基于 Alveo 卡的加速方案也正在小规模对外开发测试中。与此同时，雪湖科技的技术创新步伐还在继续，其计划未来将通过多个 Alveo 设备结合的形式继续扩展仿真能力，进一步为分子动力学计算应用提速并扩大吞吐量。

更多信息：

[进一步了解雪湖科技](#)

[进一步了解赛灵思 Alveo 加速器卡](#)

公司总部
Xilinx, Inc.
2100 Logic Drive
San Jose, CA 95124
USA
电话: 408-559-7778
www.xilinx.com

欧洲
One Logic Drive
Citywest Business Campus
Saggart, County Dublin
Ireland
电话: +353-1-464-0311
www.xilinx.com

日本
Xilinx K.K.
Art Village Osaki Central Tower 4F
1-2-2 Osaki, Shinagawa-ku
Tokyo 141-0032 Japan
电话: +81-3-6744-7777
japan.xilinx.com

Asia Pacific Pte. Ltd.
Xilinx, Asia Pacific
5 Changi Business Park
Singapore 486040
电话: +65-6407-3000
www.xilinx.com

印度
Meenakshi Tech Park
Block A, B, C, 8th & 13th floors,
Meenakshi Tech Park, Survey No. 39
Gachibowli(V), Seri Lingampally (M),
Hyderabad -500 084
电话: +91-40-6721-4747
www.xilinx.com