

## エルミート積分法による重力多体問題専用計算機 HARP-1

小久保 英一郎、牧野 淳一郎<sup>†</sup>、泰地 真弘人

東京大学教養学部宇宙地球科学教室

<sup>†</sup>東京大学教養学部情報図形科学教室

エルミート積分法による重力多体問題専用計算機 HARP-1 を開発した。エルミート積分法は高精度でかつ一段階法の簡明さをもつ積分法である。エルミート積分法では粒子を時間積分していくさいに粒子の加速度に加えてその時間微分も必要になる。HARP-1 はエルミート積分法の中でもっとも計算量の多い粒子の加速度とその時間微分の計算をパイプラインで高速に行なう。HARP-1 のパイプラインは 24 段であり、3 クロックごとに 1 つの粒子間の相互作用を計算する。すなわち、系全体の粒子数を  $N$  とすると、1 つの粒子の加速度とその時間微分は  $3N + 24$  クロック後に得られる。HARP-1 のピーク演算速度は 160Mflops である。

### **HARP-1: A Special-Purpose Computer for $N$ -body Simulation with the Hermite Integrator**

Eiichiro Kokubo, Junichiro Makino<sup>†</sup>, and Makoto Taiji

Department of Earth Science and Astronomy,

<sup>†</sup>Department of Information Science and Graphics,

College of Arts and Sciences, University of Tokyo

We have designed and built HARP (Hermite Accelerator Pipeline)-1, a special-purpose computer for solving astronomical  $N$ -body problems with a high accuracy using the Hermite integrator. The Hermite integrator uses analytically calculated time-derivatives of the acceleration, in addition to the acceleration, to integrate orbits of particles. HARP-1 has a 24-stage pipeline to perform the calculation of the acceleration and its time derivative, which is the most expensive part of the Hermite scheme. The pipeline calculates one gravitational interaction at every three clock cycles. Thus, the acceleration and its time derivative of a particle are calculated in  $3N + 24$  clock cycles, where  $N$  is the number of particles. The peak speed of HARP-1 is 160Mflops.

# 1 はじめに

球状星団、銀河といった恒星系は重力多体系とみなすことができる。重力多体系とは多数の粒子がお互いの重力で相互作用している系のことである。重力多体系の振舞いを調べるのが重力多体問題である。重力多体問題は粒子数が3以上では解析解は存在しないので数値的に解くしかない。粒子間の重力相互作用を直接計算して系の進化を調べる方法を  $N$  体シミュレーションという。

現在までのところ、高精度を必要とする  $N$  体シミュレーションにはアーセス積分法 (Aarseth 1985) が広く使われてきた。アーセス積分法では系を効率よく積分していくために粒子個別タイムステップ法を用いている。

粒子個別タイムステップ法では粒子ごとに独立な時刻とタイムステップをもたせる。重力多体系ではしばしば近接散乱が起きる。近接散乱を受けている粒子の位置や速度は急激に変化する。そのような粒子を正確に積分していくためにはタイムステップを小さくしなくてはならない。粒子個別タイムステップ法では、他の粒子のタイムステップを小さくすることなく小さいタイムステップを必要とする粒子のタイムステップを小さくすることができる。粒子個別タイムステップ法なしでは、すべての粒子を小さいタイムステップで積分することになり、非常に効率が悪くなる。

この粒子個別タイムステップ法では、ある粒子  $i$  の時刻  $t_i$  での他の全ての粒子の位置が必要になる。アーセス積分法では可変タイムステップのアダムス-バシユフォース-モルトン (ABM) 型の予測子-修正子を使うことでこの位置を求めることを可能としている。ABM 公式では過去の時刻での加速度からニュートン補間により加速度の時間変化を表す補間多項式を作り、それを積分して次の時刻での位置、速度を求める。例えば、ルンゲ-クッタ法

ではこのような自分のタイムステップから外れた時刻での位置を求めるのは難しい。

我々は4次のABM公式にかわるものとして4次のエルミート公式を開発した (Makino and Aarseth 1992)。エルミート積分法はエルミート公式を使って重力多体系を時間積分する方法である。4次のエルミート積分法では位置の予測子  $x_p$ 、速度の予測子  $v_p$  は加速度の時間微分までのテイラー級数として与えられる。すなわち、

$$x_p = x_0 + v_0 \Delta t + \frac{a_0}{2} \Delta t^2 + \frac{\dot{a}_0}{6} \Delta t^3, \quad (1)$$

$$v_p = v_0 + a_0 \Delta t + \frac{\dot{a}_0}{2} \Delta t^2, \quad (2)$$

ここで  $x_0$ 、 $v_0$ 、 $a_0$ 、 $\dot{a}_0$  はそれぞれ現在の時刻  $t_0$  における粒子の位置、速度、加速度、加速度の時間微分であり、 $\Delta t$  はタイムステップである。 $a_0$ 、 $\dot{a}_0$  は時刻  $t_0$  における粒子の位置、速度から計算される。修正子はエルミート補間多項式に基づいて作られる。まず、粒子を更新する時刻  $t_1 = t_0 + \Delta t$  におけるすべての粒子の位置と速度を予測子 (1)、(2) により計算する。次に、その予測値を使って更新する粒子の  $t_1$  における加速度  $a_1$  とその時間微分  $\dot{a}_1$  を直接計算する。そして、 $t_0$  と  $t_1$  における加速度とその時間微分から加速度の時間変化を近似する3次のエルミート補間多項式を作り、それを積分して速度、位置の修正子を作るのである。位置の修正子  $x_c$ 、速度の修正子  $v_c$  はそれぞれ次のようになる。

$$x_c = x_p + \frac{a_0^{(2)}}{24} \Delta t^4 + \frac{a_0^{(3)}}{120} \Delta t^5, \quad (3)$$

$$v_c = v_p + \frac{a_0^{(2)}}{6} \Delta t^3 + \frac{a_0^{(3)}}{24} \Delta t^4, \quad (4)$$

ここで  $a_0^{(2)}$ 、 $a_0^{(3)}$  は  $t_0$  における加速度の2階、3階の時間微分であり、

$$a_0^{(2)} = \frac{-6(a_0 - a_1) - \Delta t(4\dot{a}_0 + 2\dot{a}_1)}{\Delta t^2}, \quad (5)$$

$$a_0^{(3)} = \frac{12(a_0 - a_1) + 6\Delta t(\dot{a}_0 + \dot{a}_1)}{\Delta t^3}, \quad (6)$$

によって計算される。

予測子、修正子ともに時刻 $t_0$ よりも前の情報をひとつも使っていないことに注意してほしい。つまり、エルミート積分法は一段階法であり自動出発できる。このためエルミート積分法はアーセス積分法などの多段階法に比べて計算コードが簡単になり、粒子個別タイムステップ法と組み合わせるのに適している。また、4次のエルミート積分法は同じ計算精度でアーセス積分法より約2倍大きいタイムステップをとることができる。これはエルミート補間の打ち切り誤差の係数がニュートン補間のそれに比べて小さいためである。エルミート積分法では、加速度に加えてその時間微分も計算するので、各ステップごとの計算量も約2倍となり、全体の計算量は大きくは変わらない。しかし、専用計算機化を考えると、専用化の難しい粒子の軌道計算やタイムステップの計算、あるいはスケジューリングなどの計算量がアーセス積分法に比べて1/2-1/3に減ることが大きなメリットになる。

エルミート積分法による重力多体問題計算のための専用計算機がHARP (Hermite Accelerator Pipeline) である (Makino et al. 1993)。我々のグループはすでに重力 (加速度) 計算の専用パイプライン GRAPE (GRAVity PipE) を開発している (Sugimoto et al. 1990, Ebisuzaki et al. 1993)。GRAPE は粒子の位置、質量から重力相互作用を計算し粒子の加速度を求めるための専用計算機である。軌道積分などの計算は GRAPE に接続されているホストコンピューター (汎用のワークステーション) で行なう。エルミート積分法を加速するために GRAPE を加速度に加えその時間微分値も計算できるように拡張したものが HARP である。エルミート積分法のその他の計算は HARP が接続されるホストコンピューターで行なわれる。

ここでは HARP の試作第 1 号機である

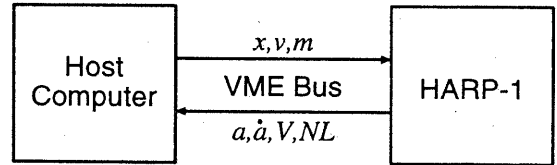


図 1: HARP-1 システムの概念

HARP-1 について述べる。2節では HARP-1 システムについて、3節では HARP-1 パイプラインについて、4節では HARP-1 システムの性能について述べる。5節はまとめである。

## 2 HARP-1 システム

HARP-1 システムの概念を図1に示す。HARP-1 システムはホストコンピューターと HARP-1 からなる。ホストコンピューターと HARP-1 の接続には VME バスを使用している。ホストコンピューターではエルミート積分法が実行される。ある粒子  $i$  の加速度 ( $\mathbf{a}_i$ ) とその時間微分 ( $\dot{\mathbf{a}}_i$ ) を計算するところになるとホストコンピューターは全粒子の位置 ( $\mathbf{x}_j$ )、速度 ( $\mathbf{v}_j$ )、質量 ( $m_j$ ) を HARP-1 に送る。HARP-1 は粒子  $i$  の加速度 ( $\mathbf{a}_i$ ) とその時間微分 ( $\dot{\mathbf{a}}_i$ )、そして単位質量あたりのポテンシャルエネルギー ( $V_i$ ) を次の式に従って計算する。

$$\mathbf{a}_i = - \sum_j Gm_j \frac{\mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}}, \quad (7)$$

$$\dot{\mathbf{a}}_i = - \sum_j Gm_j \left[ \frac{\mathbf{v}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{3/2}} \right. \quad (8)$$

$$\left. - \frac{3(\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{r}_{ij}}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{5/2}} \right], \quad (9)$$

$$V_i = - \sum_j Gm_j \frac{1}{(r_{ij}^2 + \epsilon^2)^{1/2}}, \quad (10)$$

ここで  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j$ 、 $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$  であり、 $\epsilon$  はソフトニングパラメーターである。加速度の時間微分は 2つの項に分けて計算されホス

トコンピュータで足し合わされる。また、粒子 $i$ の近接粒子リストも作成される。近接粒子リストは衝突しそうな粒子を見張るためなどに使われる。計算された結果はホストコンピュータ送られる。ホストコンピュータではHARP-1より受けとった加速度( $a_i$ )とその時間微分( $\dot{a}_i$ )を用いてエルミート補間を行い修正子を作り、粒子 $i$ の位置 $x_i$ と速度 $v_i$ を更新する。

エルミート積分法では1つの粒子を更新するごとの計算量が、粒子数を $N$ とすると $O(N)$ になる部分が3ヶ所ある。すなわち、予測子、加速度、加速度の時間微分の計算である。このうち予測子の計算は階層化タイムステップ法(Makino 1991)を用いることによって計算量を減らすことができる。HARP-1システムは残った計算量が $O(N)$ である加速度とその時間微分の計算を専用計算機化することによって、ホストコンピュータの負担を減らし、エルミート積分法を高速に実行することを可能とした。

HARP-1は汎用の浮動小数点演算チップを用いて36.7cm×40cm(9U Eurocard)のボード上に手配線により製作した。総チップ数は102であり、費用は約100万円である。

### 3 HARP-1 パイプライン

図2にHARP-1パイプラインのブロックダイアグラムを示す。基本構造は加速度の時間微分を計算する部分を除けば、GRAPE-2(Ito et al. 1991)に非常に近いものになっている。HARP-1では、粒子の位置と速度がそれぞれ $x$ 、 $y$ 、 $z$ 成分の順にパイプラインに与えられ、3クロックサイクルで1粒子が処理される“1/3アーキテクチャ”を採用した。 $x$ 、 $y$ 、 $z$ 成分にそれぞれ独立のパイプラインを設ければ、1クロックサイクルで1粒子を処理することも可能であるが、必要となる浮動小

数点演算チップは1/3アーキテクチャの約3倍になってハードウェア製作が困難になってしまう。1/3アーキテクチャではパイプラインの制御が多少難しくなるが、必要な浮動小数点演算チップは9個ですんでいる。

パイプライン中のほとんどの演算はIEEE-754規格の単精度浮動小数点(32bit)で行う。ただし、相対位置の計算( $x_i - x_j$ )と加速度とその時間微分の積算は倍精度浮動小数点(64bit)で行う。相対位置の計算と加速度の積算を倍精度浮動小数点で行なうのは、有効桁の減少を防ぐためである。加速度の時間微分の寄与は加速度のそれに比べて小さいので相対速度の計算( $v_i - v_j$ )と加速度の時間微分の積算における有効桁の減少は大きな問題とはならない。加速度の時間微分の積算を倍精度浮動小数点で行なっているのは3つの積算器の制御を共通化して制御論理を単純化するためである。倍精度浮動小数点演算にはWeitek社の3364を、単精度浮動小数点演算にはLSI Logic社のL64134を用いた。3364は1つの乗算器と1つの加(減)算器と32ワードのレジスタファイルを持つ。L64134は1つの乗算器と1つの加(減)算器と4つの入力レジスタを持つ。図3において3364は(A)、(H)+(I)、(J)+(K)、(L)+(M)の計4個である。ここで、(X)+(Y)というのは1つのチップ上の乗算器が演算(X)を行ない加(減)算器が演算(Y)を行なうことを示す。L64134は(B)、(C)、(D)、(E)+(F)、(G)の計5個である。(C)と(D)はそれぞれ1つの乗算器と1つの加(減)算器で実行される。

ホストコンピュータから送られる全粒子の位置( $x_j$ )、速度( $v_j$ )、質量( $m_j$ )はHARP-1上のRAMに書き込まれる。RAMは128kワードであり、最大42k体の粒子を扱うことができる。粒子 $i$ の位置( $x_i$ )は減算器(A)のレジスタファイルに、速度( $v_i$ )は減算器(B)の入力レジスタに書き込まれる。

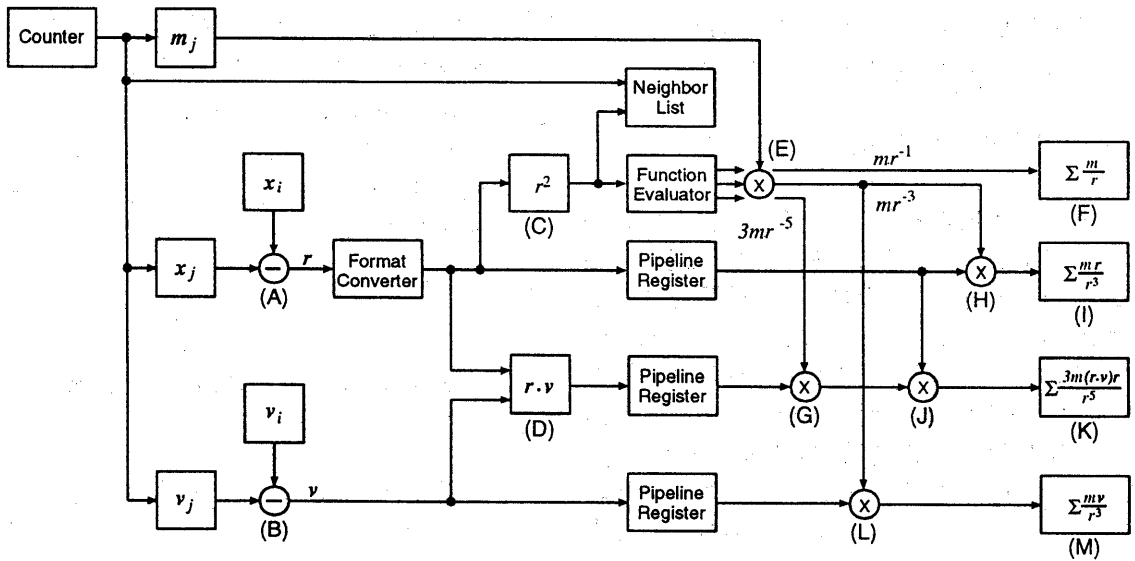


図 2: HARP-1 パイプラインのブロックダイアグラム

パイプラインは以下のように動作する。ホストコンピューターによって HARP-1 のカウンター (Counter) の初期値が書き込まれると、パイプラインは作動し始める。カウンターは粒子番号を出力する。それを受けて  $x_j$ 、 $v_j$  の RAM はクロックごとに  $x$ 、 $y$ 、 $z$  成分の順で  $x_j$ 、 $v_j$  を出力する。 $m_j$  の RAM は 3 クロックごとに  $m_j$  を出力する。

RAM の出力  $x_j$ 、 $v_j$  はそれぞれ減算器 (A)、(B) の入力となる。(A) では相対位置、 $r_{ij} = x_i - x_j$  が、(B) では相対速度、 $v_{ij} = v_i - v_j$  が計算される。倍精度で計算された相対位置 ( $r_{ij}$ ) は型変換器 (Format Converter) で単精度に変換される。型変換は倍精度 (64bit) のデータの必要な 32bit を切り出すことにより行なわれるが、この論理は PLD によって組まれている。

相対位置 ( $r_{ij}$ ) は距離自乗計算ユニット (C) に送られる。(C) ではソフトニングされた相対距離の自乗すなわち、 $r_s^2 = |r_{ij}|^2 + \epsilon^2$  が計算される。 $\epsilon^2$  は (C) の入力レジスタにあらかじめ書き込んである。相対位置 ( $r_{ij}$ ) と相対

速度 ( $v_{ij}$ ) は内積計算ユニット (D) に送られる。(D) では  $r_{ij} \cdot v_{ij}$  が計算される。

相対位置 ( $r_{ij}$ )、相対速度 ( $v_{ij}$ )、そしてそれらの内積 ( $r_{ij} \cdot v_{ij}$ ) は  $m_j r_s^{-3}$  と  $3m_j r_s^{-5}$  が計算されるまでパイプラインレジスタ (Pipeline Register) で待ち合わせする。

$r_s^2$  は関数評価 (Function Evaluator) ユニットに送られる。このユニットでは  $r_s^2$  を基に線形補間によって  $r_s^{-1}$ 、 $r_s^{-3}$ 、 $3r_s^{-5}$  が計算され、クロックごとに出力される。線形補間はテーブル (ROM) 参照によって行われる (詳しくは Makino et al. 1993 参照)。この方法を使うと浮動小数点演算チップを使って関数を評価するのに比べて非常に小規模の回路で関数の評価ができる。

$r_s^2$  はまた、近接粒子リスト (Neighbor List) ユニットにも送られる。このユニットでは  $r_s^2$  とあらかじめホストコンピューターから書き込まれている近接粒子半径  $h$  の自乗とを比べる。 $r_s^2 < h^2$  ならばその粒子の番号 (カウンターの値) を FIFO に書き込む。このようにして近接粒子リストは作られる。

関数評価ユニットの出力は乗算器(E)に送られ、そこで質量 $m_j$ と掛け合わされ、 $m_j r_s^{-1}$ 、 $m_j r_s^{-3}$ 、 $3m_j r_s^{-5}$ となる。 $m_j r_s^{-1}$ はそのまま加算器(F)で積算されて単位質量あたりのポテンシャルエネルギー $V_i$ となる。

$m_j r_s^{-3}$ は乗算器(H)でパイプラインレジスタで待ち合わせをしていた相対位置( $r_{ij}$ )と掛け合わされ、加算器(I)で積算されて加速度( $a_i$ )となる。 $m_j r_s^{-3}$ はまた、乗算器(L)でパイプラインレジスタで待ち合わせをしていた相対速度( $v_{ij}$ )と掛け合わされ、加算器(M)で積算されて加速度の時間微分の第1項、 $\sum_j m_j r_s^{-3} v_{ij}$ となる。 $3m_j r_s^{-5}$ は、まず乗算器(G)でパイプラインレジスタで待ち合わせをしていた内積( $r_{ij} \cdot v_{ij}$ )と掛け合わされ、その後さらに乗算器(J)でパイプラインレジスタにより待ち合わせをしていた相対位置( $r_{ij}$ )と掛け合わされ、加算器(K)で積算されて加速度の時間微分の第2項、 $\sum_j 3m_j r_s^{-5} (r_{ij} \cdot v_{ij}) r_{ij}$ となる。

すべての計算結果は粒子数を $N$ とすると、 $3N + 24$ クロック後に得られる。ここで、24はパイプラインによる遅れである。HARP-1のクロックサイクルは8MHzである。サイクルごとの浮動小数点演算は約20演算である。よって、HARP-1のピーク演算速度は $20 \times 8 = 160$ Mflopsとなる。

## 4 性能

階層化タイムステップ法(Makino 1991)を用いた場合、HARP-1を用いたエルミート積分法は以下ようになる。

- (a) 時刻 $t_i + \Delta t_i$ が最小となる粒子 $i$ をすべて見つける。系の時刻 $t$ を $t_i + \Delta t_i$ とする。
- (b) すべての粒子の $t$ における位置と速度を予測し、その値をHARP-1に送る。

(c) (a)で選択された粒子 $i$ の加速度とその時間微分をHARP-1で計算する。

(d) HARP-1から受けとった加速度とその時間微分を用いてエルミート補間をして修正子を作り、粒子 $i$ の位置と速度を修正する。 $t_i$ を更新し、新たに $\Delta t_i$ を計算する。

(e) (a)に戻る。

この場合の積分ステップあたりの計算時間 $T_{\text{step}}$ は次ようになる。

$$T_{\text{step}} = T_{\text{pred}} + T_{\text{harp}} + T_{\text{misc}}, \quad (11)$$

ここで $T_{\text{pred}}$ 、 $T_{\text{harp}}$ 、 $T_{\text{misc}}$ は

$$T_{\text{pred}} = \frac{N}{N_g} t_{\text{pred}}, \quad (12)$$

$$T_{\text{harp}} = N t_{\text{pipe}}, \quad (13)$$

$$T_{\text{misc}} = t_{\text{misc}}, \quad (14)$$

であり、 $t_{\text{pred}}$ は1粒子の予測値を計算しその結果をHARP-1に送るのに必要な時間、 $t_{\text{pipe}}$ はHARP-1で粒子間の1相互作用を計算するのに必要な時間、 $t_{\text{misc}}$ は1粒子の位置と速度を更新するのに必要な時間である。 $N_g$ は平均の同じ時刻にいる粒子数である。 $T_{\text{pred}}$ はステップ(b)にかかる時間である。予測値の計算量は粒子数を $N$ として $O(N)$ で、計算は平均して $N_g$ 積分ステップごとに行なわれる。 $T_{\text{harp}}$ はステップ(c)にかかる時間である。 $T_{\text{misc}}$ はステップ(a)と(d)にかかる時間で粒子数 $N$ とは無関係である。

比較的一様に近い粒子分布をもつ系では

$$N_g \simeq (0.5N)^{\frac{2}{3}} \quad (15)$$

となる(Makino 1991)。ホストコンピュータとしてSolbourne Computer S4000を用いた場合、 $t_{\text{pred}}$ 、 $t_{\text{misc}}$ はそれぞれ $35\mu\text{s}$ 、 $180\mu\text{s}$ である。クロック周波数8MHzのHARP-1で

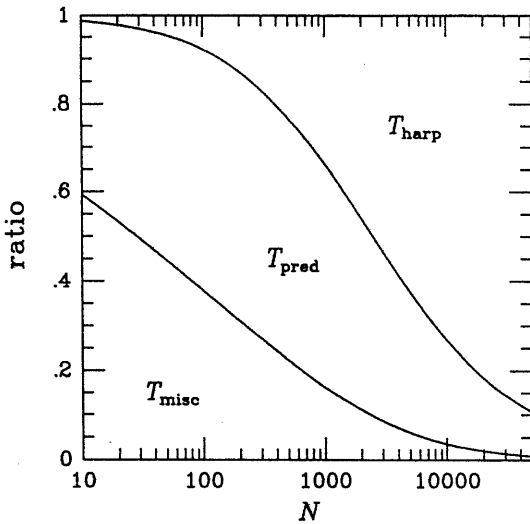


図 3:  $T_{\text{step}}$  の  $T_{\text{pred}}$ 、 $T_{\text{misc}}$ 、 $T_{\text{harp}}$  の比

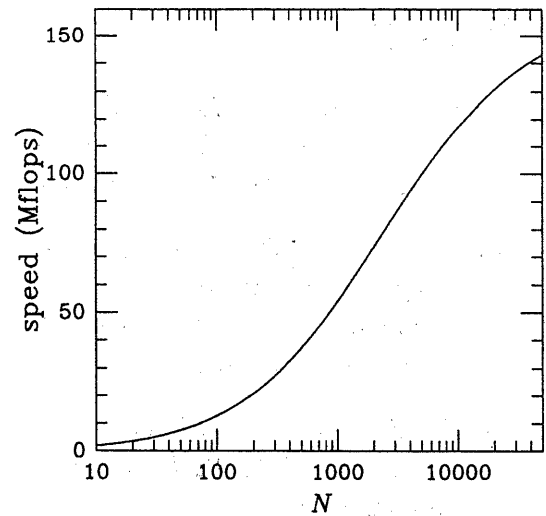


図 4: HARP-1 の実効演算速度

は、 $t_{\text{pipe}}$  は  $3/8 = 0.375 \mu\text{s}$ . となる。以上より、 $T_{\text{step}}$  は

$$T_{\text{step}} = 3.8 \times 10^{-7} N + 5.6 \times 10^{-5} N^{\frac{1}{2}} + 1.8 \times 10^{-4} \text{ (s)} \quad (16)$$

となる。

図 3 に  $N$  の関数として  $T_{\text{pred}}/T_{\text{step}}$ 、 $T_{\text{misc}}/T_{\text{step}}$ 、 $T_{\text{harp}}/T_{\text{step}}$  を、図 4 に  $N$  の関数として HARP-1 の実効演算速度を示す。 $N$  が小さいと  $T_{\text{misc}}$  が計算時間を支配する。すなわち、ほとんどの時間 HARP-1 はなにもしないでいる。 $N$  が 100 を越えると  $T_{\text{pred}}$  の割合が最大となる。 $N$  が 2000 以上では  $T_{\text{harp}}$  の割合が最大となる。すなわち、 $N$  が 2000 以上のシミュレーションでは HARP-1 の実効演算速度はピーク演算速度の 50% 以上となる。

## 5 まとめ

我々はエルミート積分法による重力多体問題専用計算機 HARP-1 を開発した。エル

ミート積分法は簡明でかつ高精度を実現できる時間積分法である。エルミート積分法では粒子の加速度の時間変化をエルミート補間多項式で近似し、それを積分することによって粒子の位置や速度を計算する。加速度の時間変化のエルミート補間多項式を作るさいには加速度の値に加えてその時間微分値も必要になる。HARP-1 はエルミート積分法を加速するための専用計算機で、加速度とその時間微分を高速に計算する 24 段のパイプラインをもつ。HARP-1 のピーク演算速度は 160 Mfops である。

HARP-1 は平成 5 年 3 月から稼働している。HARP-1 は原始太陽系における原始惑星-微惑星系の進化の研究に使われている。また、HARP-1 パイプラインのアーキテクチャを 1 つの LSI チップに納める HARP チップの設計も完了した (Makino et al. 1993, Taiji et al. 1993)。HARP チップは我々のグループで現在開発中の Tflops の性能を達成する重力多体問題専用計算機 GRAPE-4 の心臓部となる。

## 参考文献

- Aaseth, S. J. 1985, in *Multiple Time Scales*,  
ed. J. U. Brackhill and B. I. Cohen  
(Academic Press, New York), p.377.
- Ebisuzaki, T., Makino, J., Fukushige, T.,  
Taiji, M., Sugimoto, D., Ito, T., and  
Okumura, S. K. 1993, *Publ. Astron.  
Soc. Japan*, **45**, 269.
- Ito, T., Ebisuzaki, T., Makino, J., and Sug-  
imoto, D. 1991, *Publ. Astron. Soc.  
Japan*, **43**, 547.
- Makino, J. 1991, *Publ. Astron. Soc. Japan*,  
**43**, 859.
- Makino, J., and Aarseth, S. J. 1992, *Publ.  
Astron. Soc. Japan*, **44**, 141.
- Makino, J. Kokubo, E., and Taiji, M. 1993,  
*Publ. Astron. Soc. Japan*, **45**, 349.
- Taiji, M., Makino J., Kokubo, E., Ebisuzaki,  
T., and Sugimoto, D. 1993, 本集録