

AIを用いた 銀河シミュレーションの高速化

藤井 通子

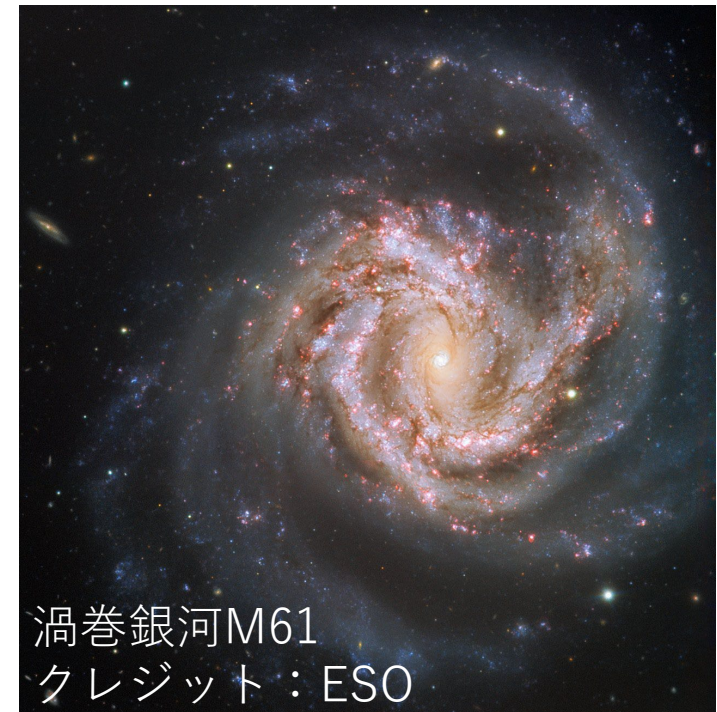
(東京大学理学系研究科天文学専攻)

チームメンバー：**平島敬也**（理研）、原田直人、森脇可奈（東大）、斎藤貴之（神戸大）、
牧野淳一郎（神戸大/PFN）、野村昂太郎（PFN）、吉川耕司（筑波大）、岡本崇（北大）、
朝野哲郎（バルセロナ大）、岩澤全規（松江高専）

画像：銀河形成シミュレーション（クレジット：斎藤貴之）

自己紹介

- 2010年学位取得（東京大学理学系研究科天文学専攻）
- 主な研究テーマ：大規模数値シミュレーションを用いた銀河や星団の進化
 - スパコンを使ってシミュレーション（「富岳」等、1000CPUコア以上を使う）
 - 現在、「富岳」成果創出加速プログラムの内、宇宙・惑星の課題のサブ課題代表
 - GPUクラスタを使ったプロジェクトにも参加
 - 2014年ゴードンベル賞ファイナリストのメンバー：アメリカのGPUクラスタ「Titan」を使って、18600GPU並列計算



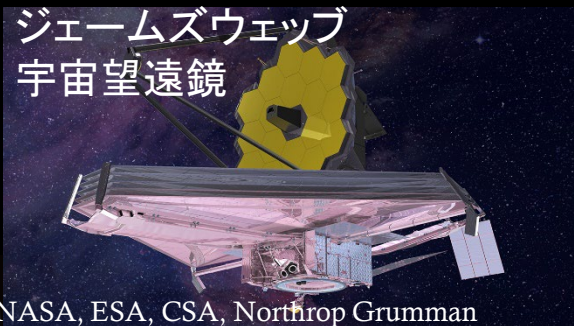
天の川銀河

- 私たちの住んでいる銀河
- 常に横からしか見ることができない

我々の宇宙の理解

新しい望遠鏡
ができるたび、
新しい謎が現
れる

ジェームズウェッブ
宇宙望遠鏡



©NASA, ESA, CSA, Northrop Grumman

JADES-GS-z14-0

©NASA, ESA, CSA, STScI, Brant
Robertson (UC Santa Cruz), Ben
Johnson (CfA), Sandro Tacchella
(Cambridge), Phill Cargile (CfA)

$z=1.05$
合体途中の銀河

© NASA/STScI/CEERS/TACC/S.
Finkelstein/M. Bagley/R. Larson/Z.
Levy

渦巻銀河 NGC 521

©国立天文台

銀河

星が何千億個と
集まっている天体

宇宙年齢

40万年

1億年

10億年

40億年

80億年

138億年

ビッグバン

宇宙の晴れ上がり

暗黒時代

初代天体形成

現在

遠くを見ること＝昔をみること

1000

100

10

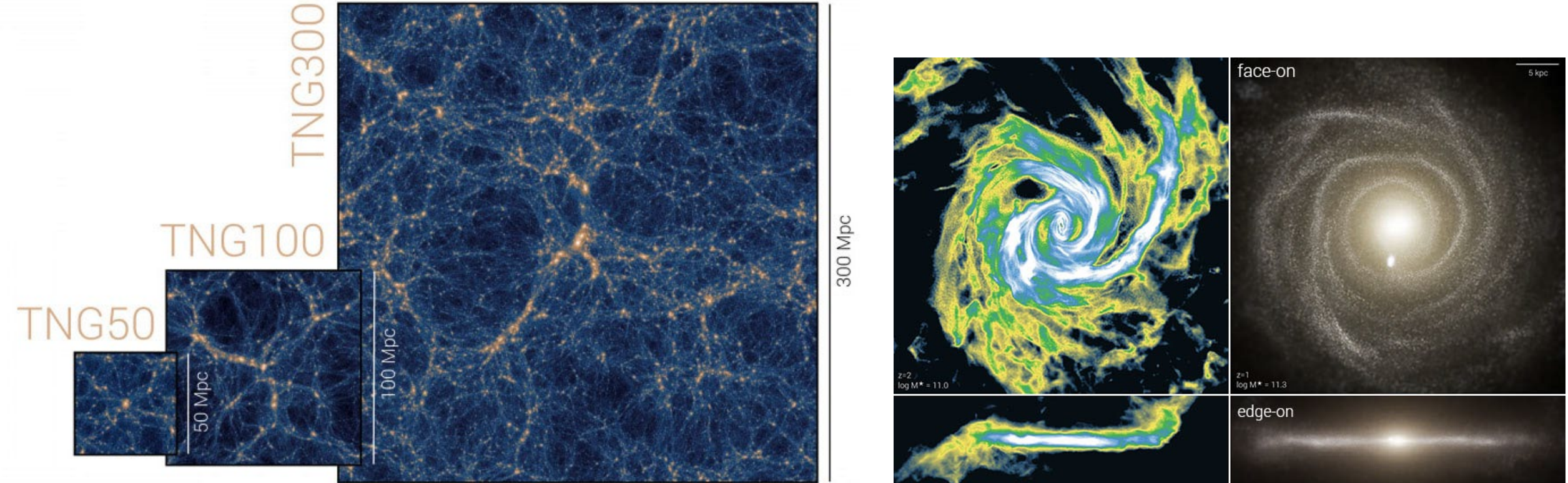
1

1+赤方偏移

©国立天文台

宇宙の時間進化を再現するシミュレーション

Illustris-TNG Projectより <https://www.tng-project.org/about/>



- 宇宙の初期揺らぎからの時間発展を計算
- 網目状に広がるダークマターの集まるところに星ができ、銀河ができる

ボリュームを増やす計算から分解能を上げる計算へ

Illustris-TNG Projectより <https://www.tng-project.org/about/>

Hazel Hen
(Cray XC40)
>1 year
(130M CPU h)
16 320 コア

TNG300

34.9 M CPU h
24 000 cores

TNG100

300 Mpc

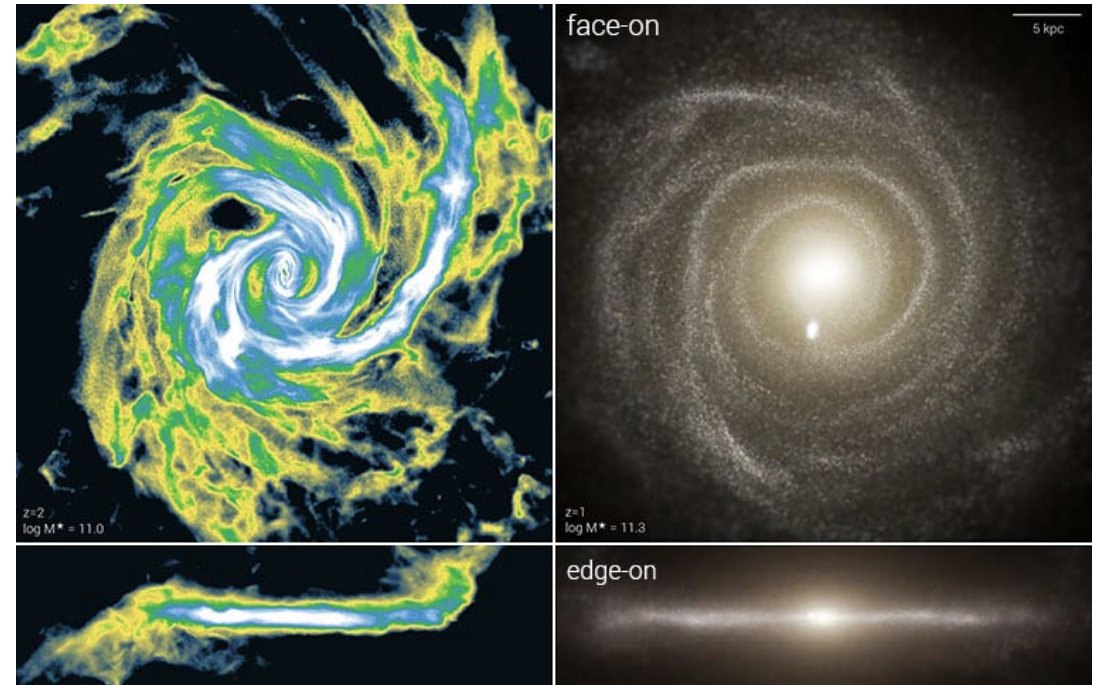
~ 5×10^{10} 粒子

TNG50

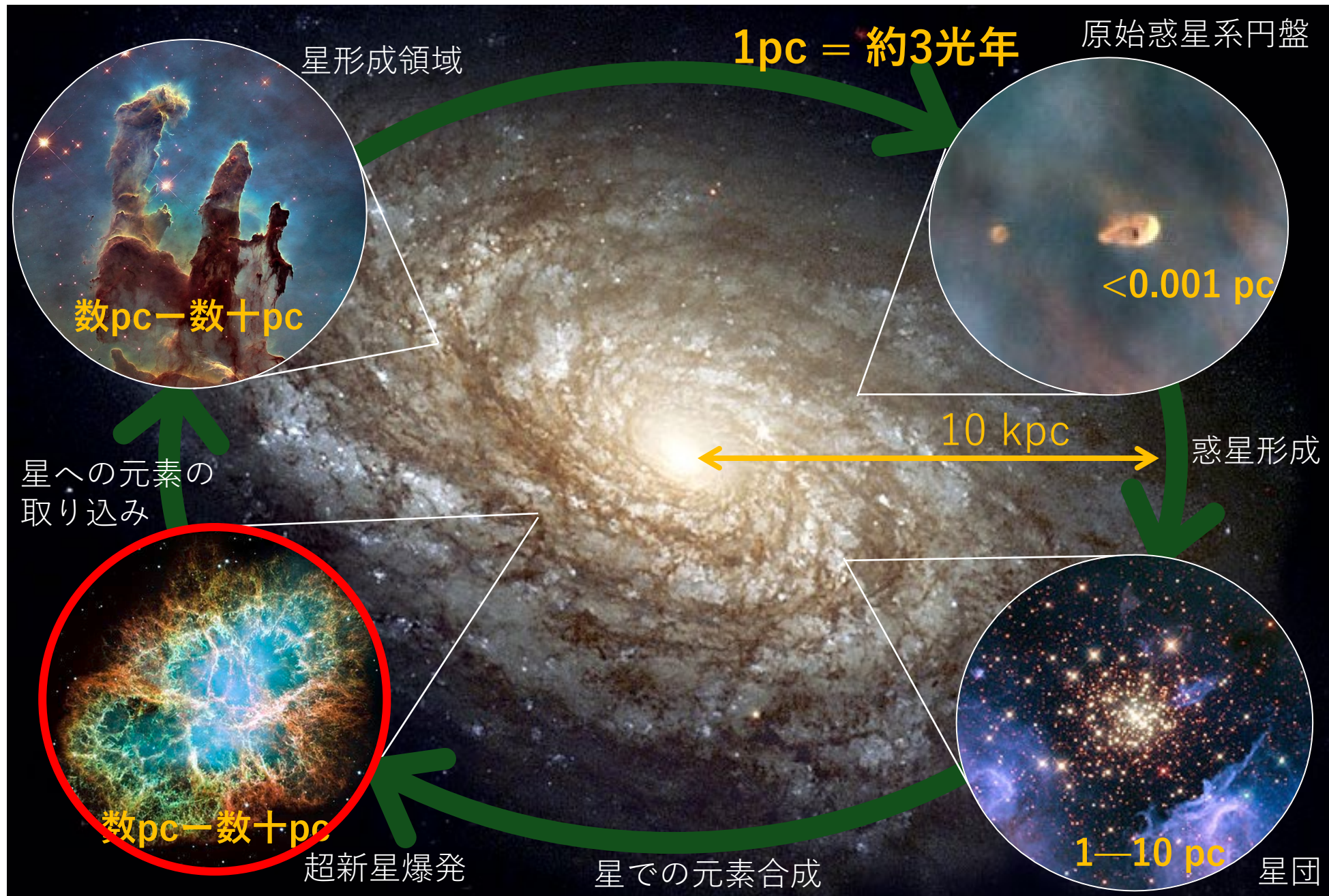
50 Mpc

100 Mpc

130M CPU h

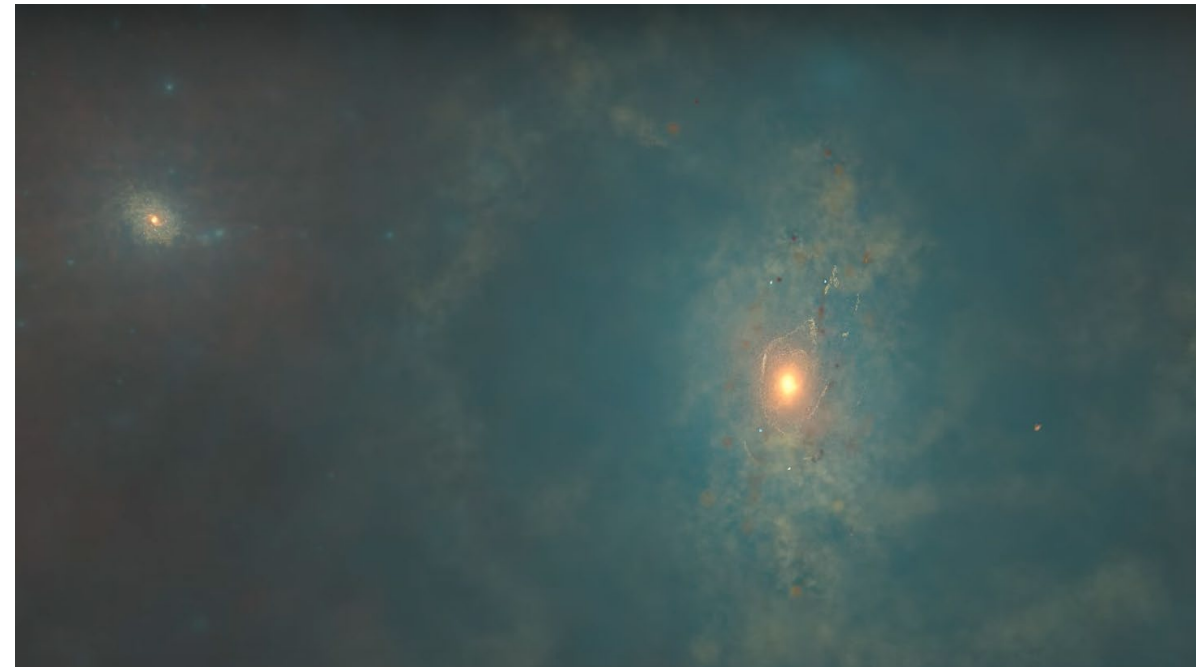


- 分解能を固定し、計算ボックスサイズを上げる計算は比較的簡単
- 一つの銀河を高分解能で計算するのは大変だが、皆がやりたいこと



銀河のシミュレーション

- 星、星間ガス、ダークマターからなる系
- これらを粒子で表現し、その運動を計算し、時間発展させる
 - ある時間で重力や流体の計算を行い、常微分方程式を数値積分
- 今のスパコンで扱える粒子の数は 10^9 個くらい
 - 天の川銀河の銀河円盤の星の数は 10^{10-11} 個くらい
 - 数個の星を一つの粒子として扱う方法が主流
 - 星一つ一つを粒子で表現したい
- 幅広い時間・空間スケール
 - 宇宙年齢130億年(10^{10} 年)



重力多体問題

- 多数の粒子からなる系のシミュレーション
 - 銀河、星団、惑星系など

- 毎ステップ粒子間に働く重力を計算→位置と速度を更新

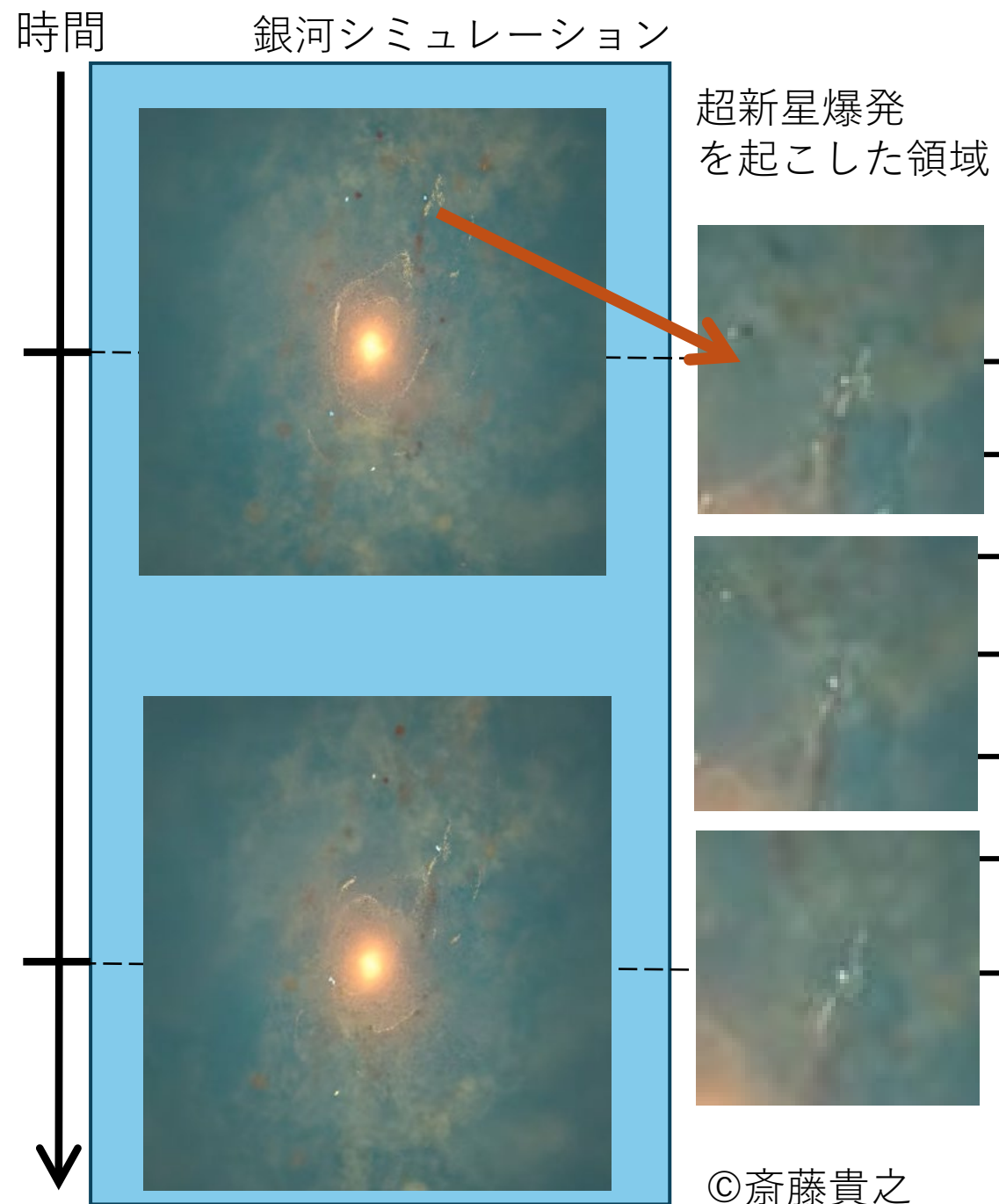
- シンプルな運動方程式

$$\frac{d^2 \mathbf{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i, 1 \leq j \leq N} G m_j \frac{\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i}{|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i|^3}$$

- 計算コストは $O(N^2)$ だが、ツリー法を使って $O(N \log N)$ に
- 流体を粒子で表現する方法(smoothed-particle hydrodynamics; SPH法)と組み合わせて、ダークマター＋星＋星間ガス（流体）から成る系も表現できる
- 重力は遠方からの寄与も評価しなければならないので、大変

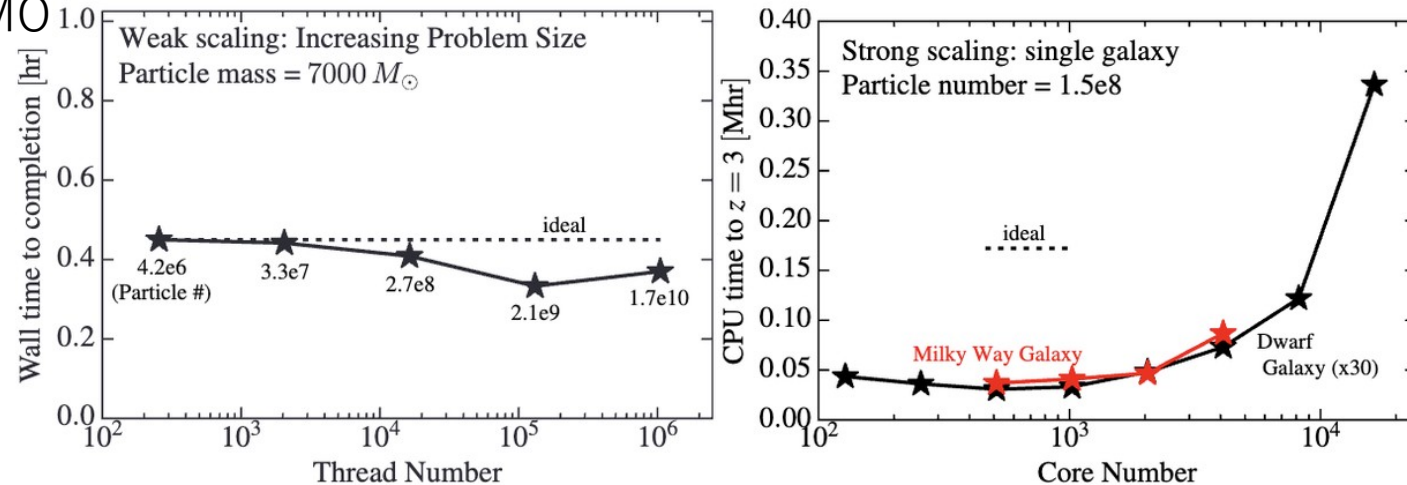
大規模並列 シミュレーションの課題

- 銀河の構造は細かいところまで見るとかなり複雑
 - 一部の低温高密度ガスから星が生まれる
 - 寿命が来た大質量星は超新星爆発を起こして、周囲の星間ガスを高温に
- 細かい構造は短い時間スケールで時間変動するので、時間刻みも短くなる（全体の構造の時間スケールに対し3-5桁違う）
- 短い時間刻みを必要とする粒子は一部
 - ロードバランスが悪くなる
 - ノード間通信が増えて、通信のオーバーヘッドが大きくなる
（10000コアを超えてくると致命的）

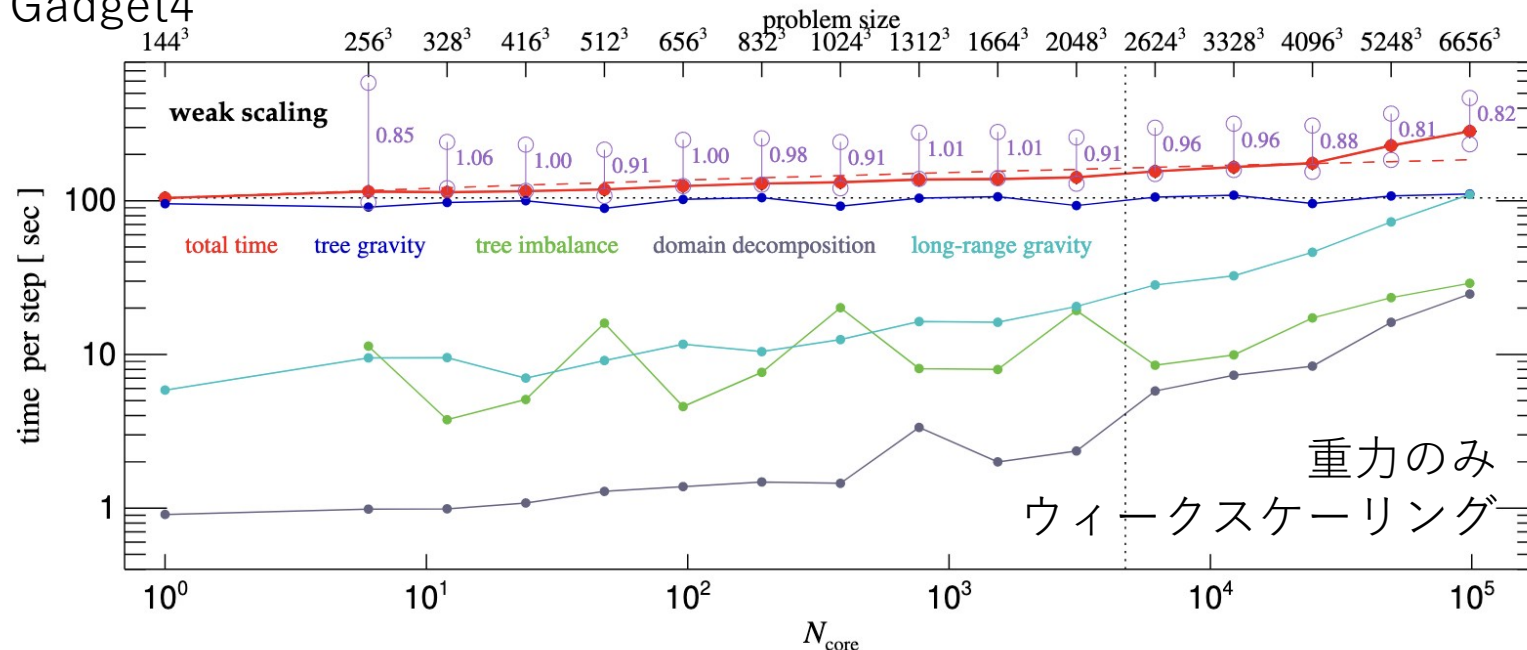


銀河のシミュレーションでの並列化効率

GIZMO



Gadget4



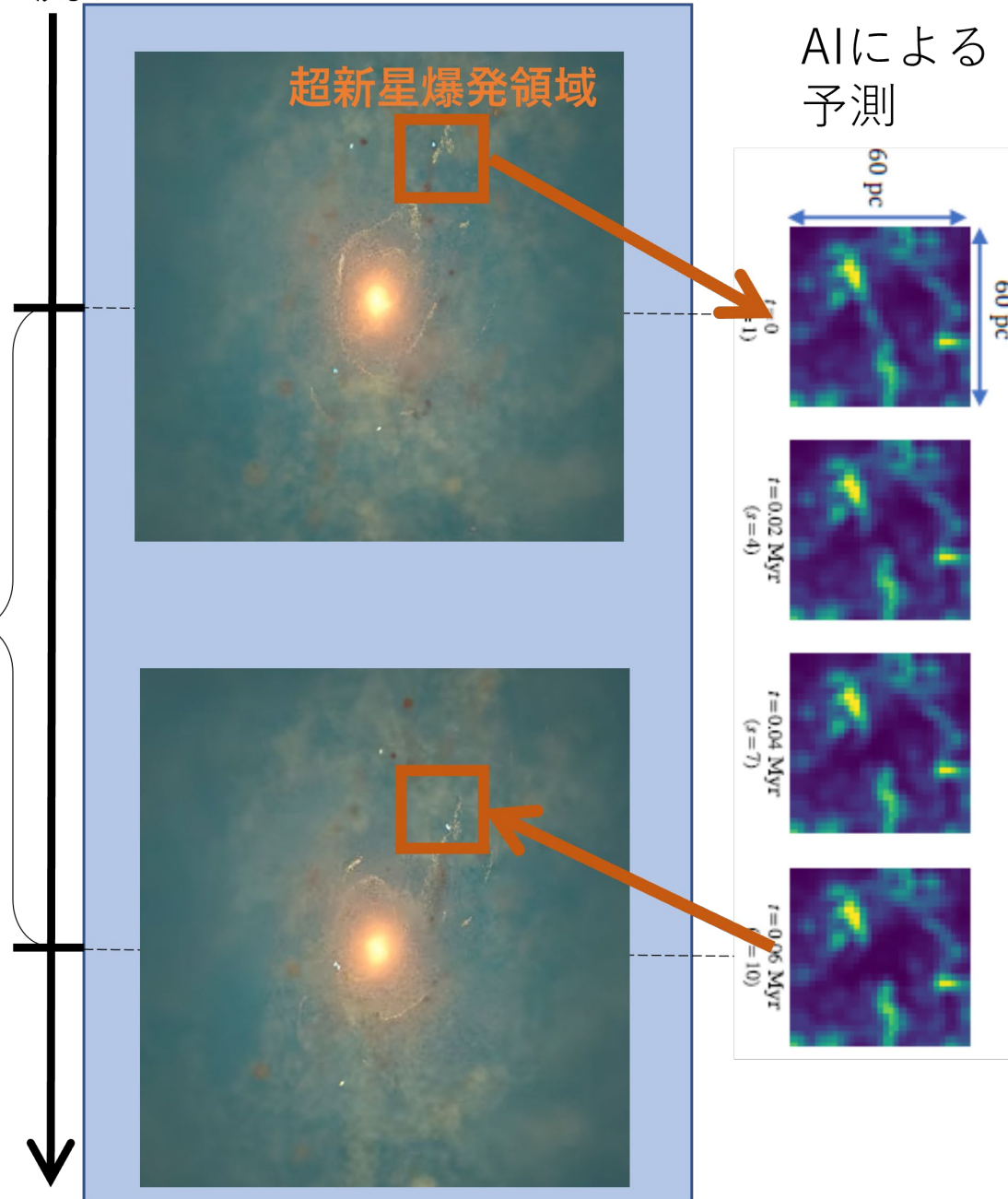
- 現在の銀河形成シミュレーションで用いられているコードの並列化効率の例
- 数千コアを超えるとそれ以上速くならない
- 銀河の規模を固定すると、粒子数 N を増やして分解能を上げるとステップ数は $N^{1/3}$ で増える

AIの利用

- 短い時間刻みを必要とする現象を、数値積分せずにAIによる予測で置き換えられないか？
 - 今でも、分解できない小さなスケールの現象は、サブグリッドモデルと呼ばれる物理に基づいたモデルで計算されている（例：星形成）
- **超新星爆発後のシェルの膨張シミュレーションの結果を学習**
→ **機械学習で予測するモデル**（サロゲートモデル）を作成
（平島、藤井他 2023）
- 銀河のシミュレーションに組み込む

時間の流れ

シミュレーション

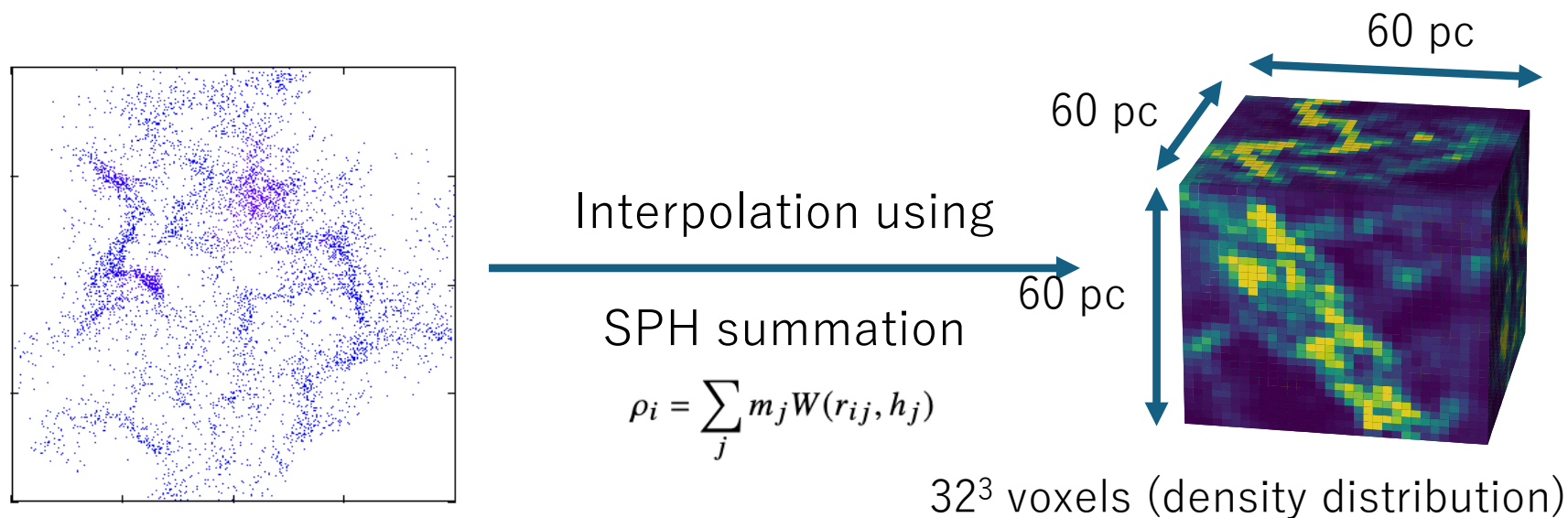


学習データの作成

平島、藤井他 (2023, MNRAS)

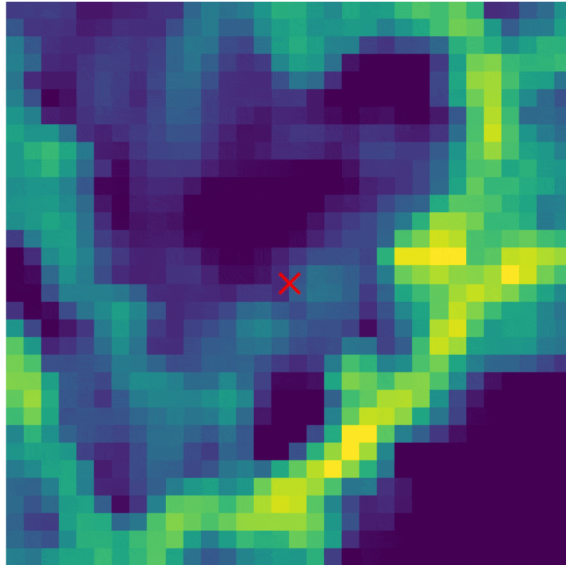
粒子法(smoothed particle hydrodynamics)で計算した超新星爆発後のシェルの膨張を3次元メッシュデータへ

ガスの温度	10 [K]
ガスの平均密度	40 ~ 60 [cm ⁻³]
爆発のエネルギー	10 ⁵¹ [erg]
ガスの総質量	10 ⁶ [M _⊙]
ガス粒子一つの質量	1 [M _⊙]
ソフトニング長 (空間分解能)	0.5 [pc]

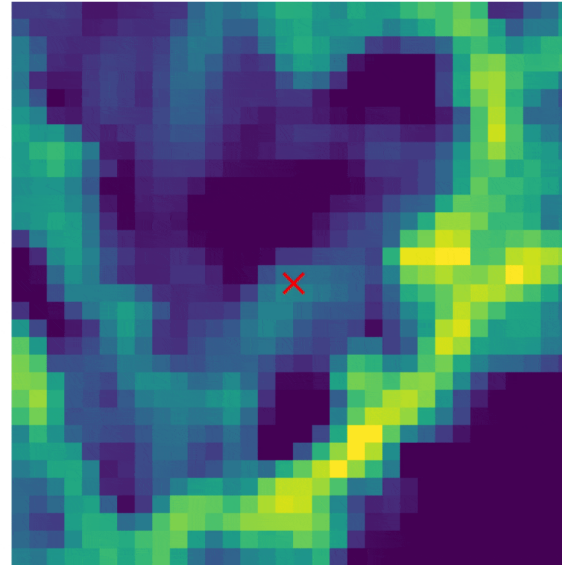


超新星爆発後のシェルの膨張の推論

学習データは左のような分布だが、それを使って、解析解のある等密度の場合も推論できる

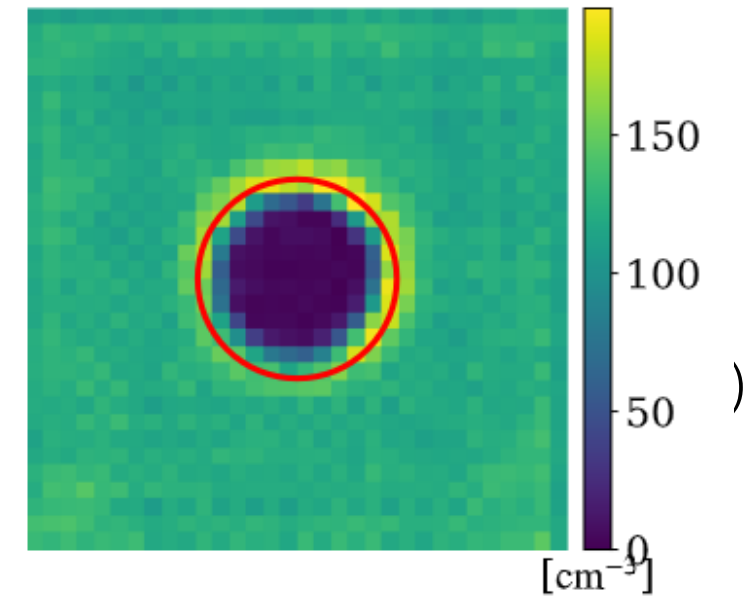


Simulation (t=0.007 Myr)



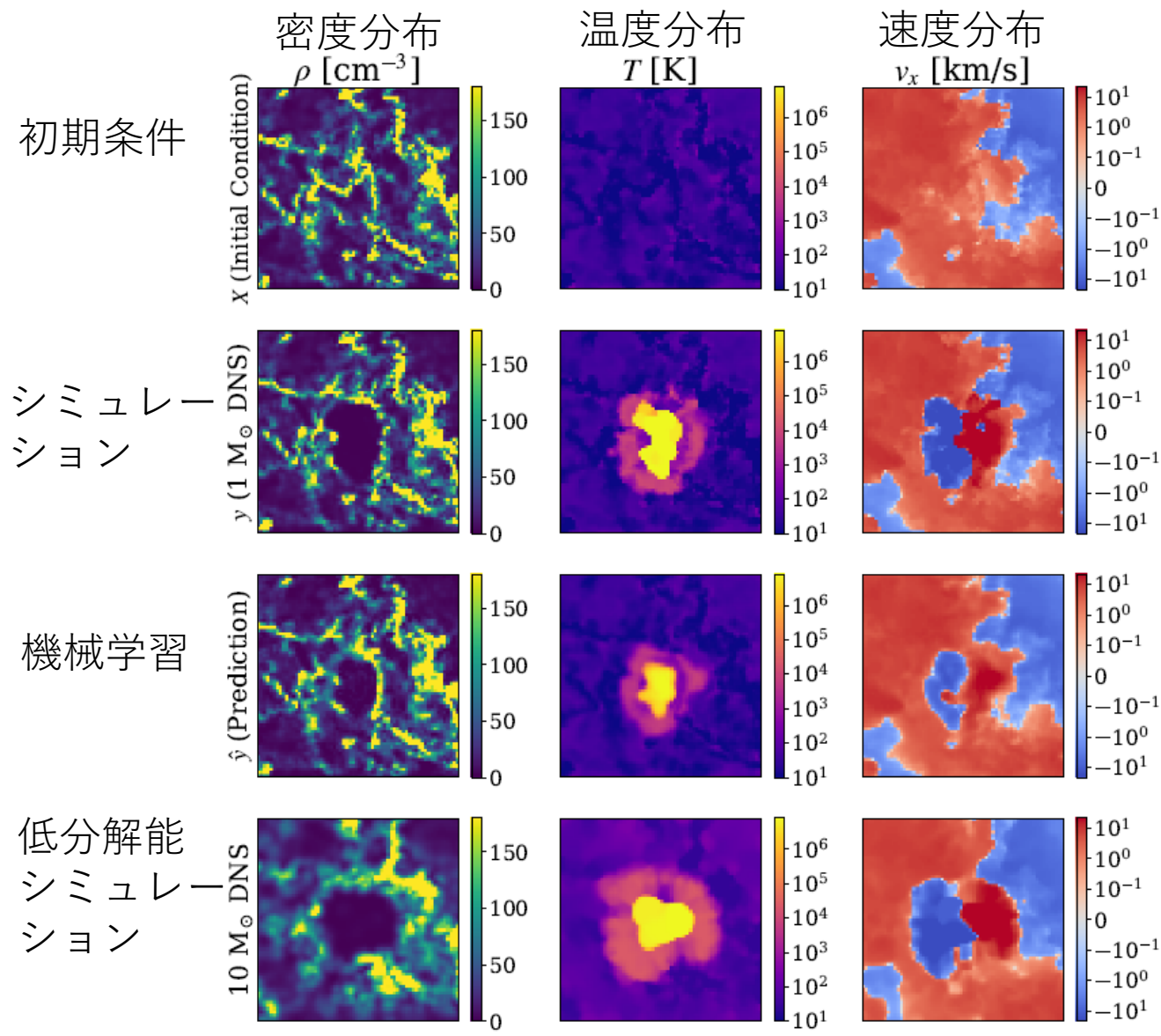
3D-MIM (t=0.007 Myr)

- Memory In Memoryというモデルで密度変化を3次元で推論
 - 19枚の時系列データを出力
- モルフォのSoftNeuro[®]を用いて高速化
 - 「富岳」で使えるライブラリは最適化されておらず、とても遅かった



(a) Spherical

超新星爆発後のシェルの膨張のAIによる再現



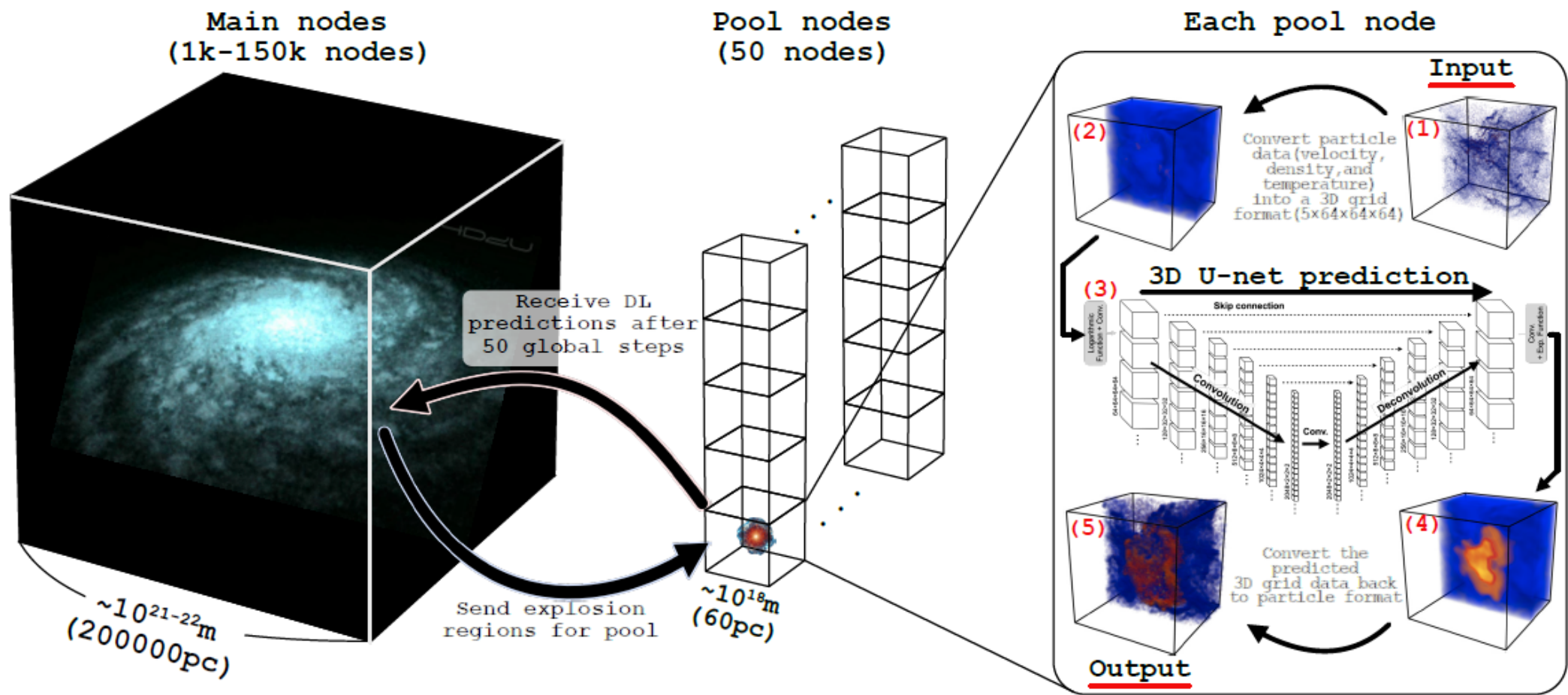
- U-Netを用いて、密度、温度、速度を予測

- 大規模シミュレーションに組み込むため、高速かつ軽量（メモリをあまり使わない）なモデルが必要
- 森脇（東京大学）、S. Ho (Flatiron Institute, US)との共同研究

- 低分解能のシミュレーションより、機械学習の方が高分解能のシミュレーション結果に近い

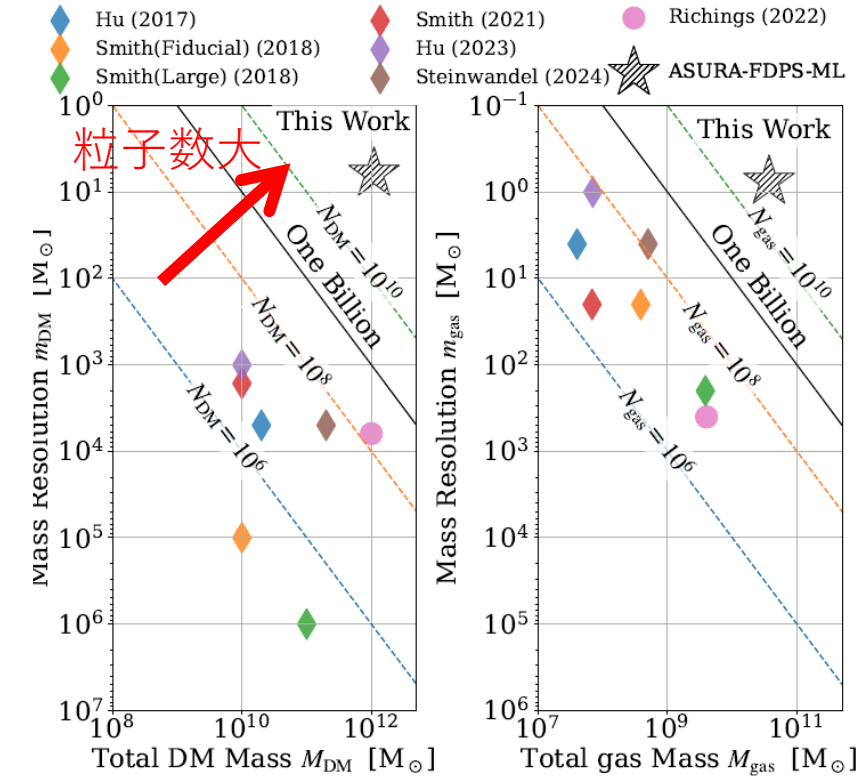
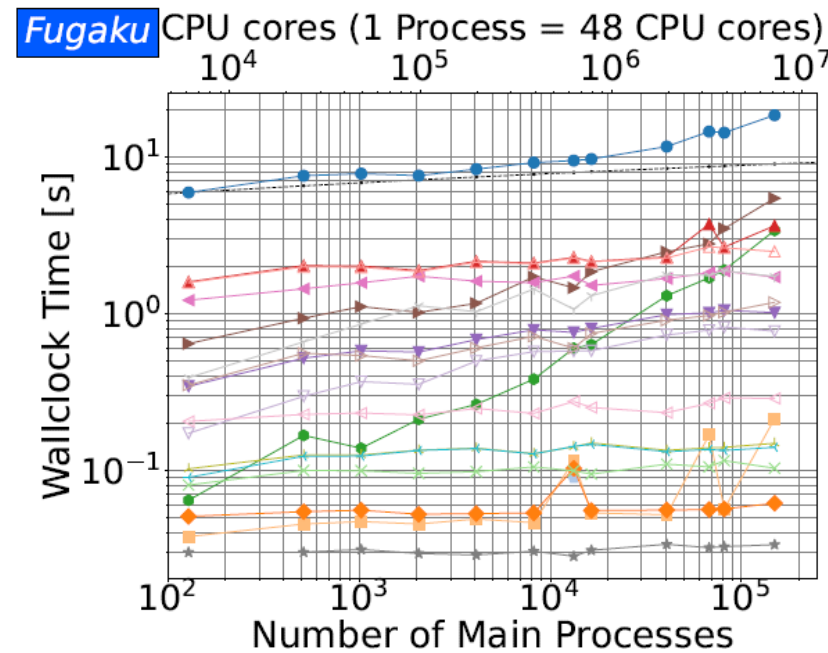
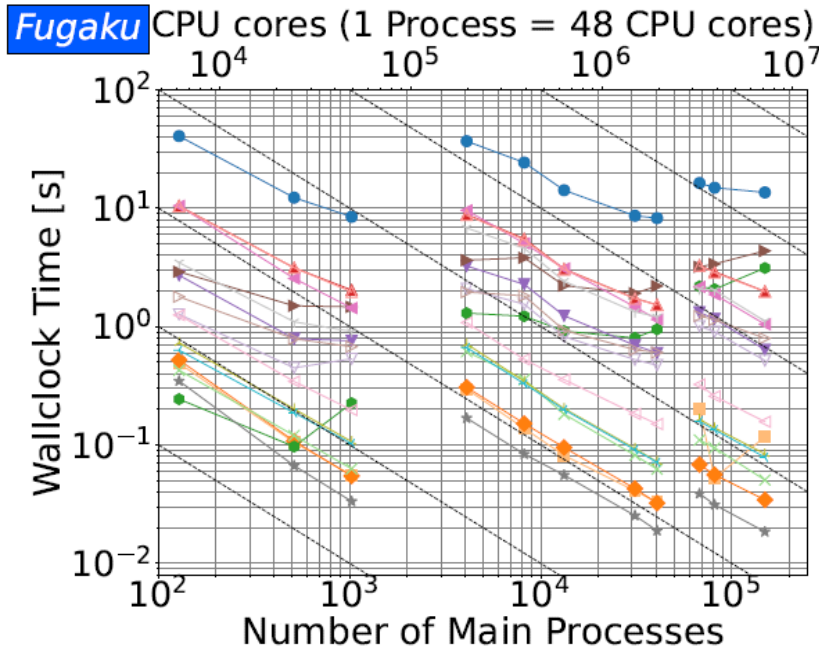
- エネルギーが保存していない系
- 運動エネルギーや熱エネルギーのずれ方にバイアスがないことは確認

銀河シミュレーションに組み込む



- 50MPIプロセス(Pool nodes)をMLのように確保
- 残りのプロセス(Main nodes)は重力・流体計算、時間積分などを行う

「富岳」での大規模実行

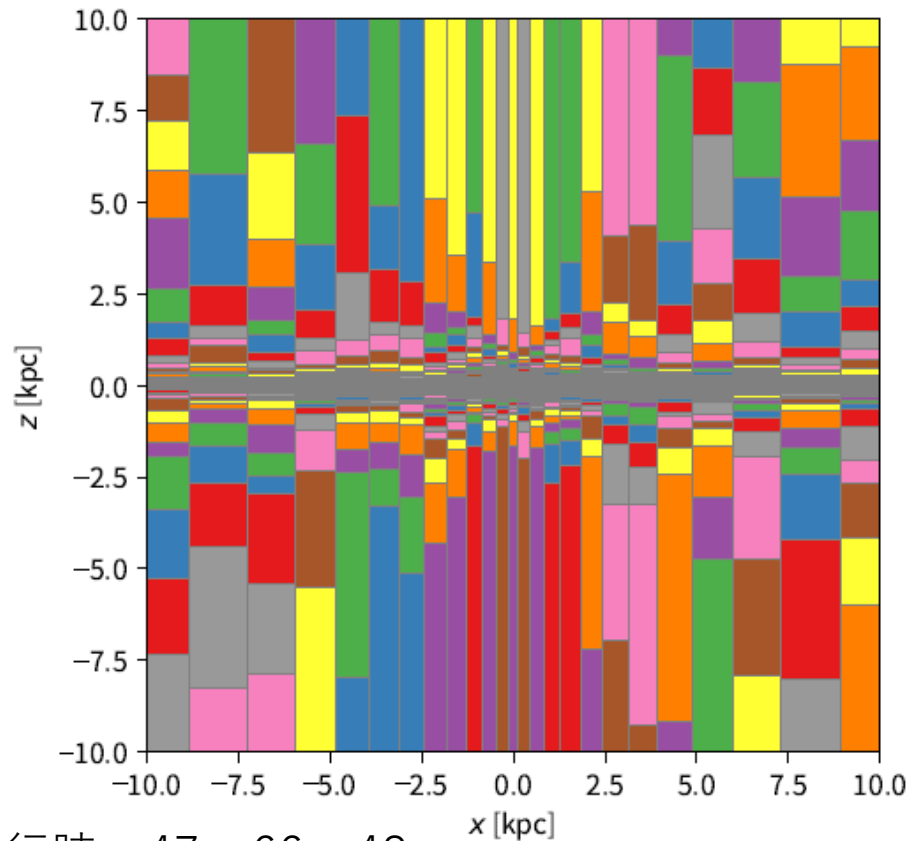


合計 3×10^{11} 粒子

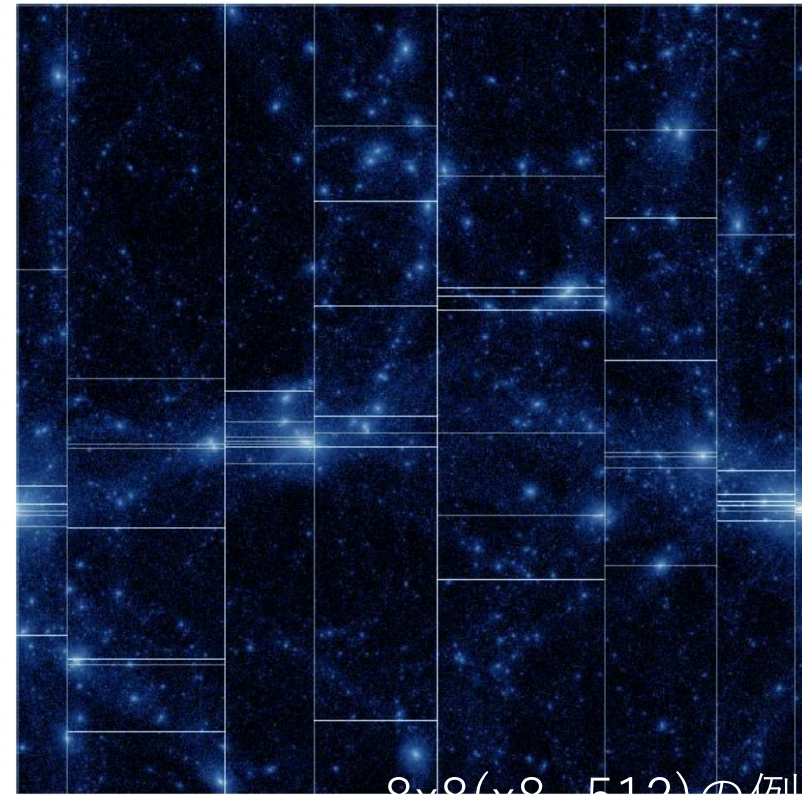
- 1ステップ10秒を切るくらいまで速度が出る (2か月で10億年の計算が終わる)
- 10000並列を超えてくると、通信が見えてしまう
 - 1プロセスあたりの粒子数が増えれば、相対的に通信は気にならなくなる
- 重力計算が一番重い、計算は効率よくできていて、流体計算など、重力以外の部分が同じくらいボトルネックとなってしまう

ちなみに...

- 中心にいくと密度（粒子数）は冪乗分布で増えるので、領域分割したときの各ノードの担当する領域の不均一性はなかなか厳しい...



全系実行時：47 x 66 x 48



Ishiyama et al. (2012) より, Gordon-Bell賞

まとめと今後の展望

- 天の川銀河サイズの銀河の形成過程を星一つ一つまで再現してシミュレーションしたい
 - 5桁以上異なる時間・空間スケールを扱うことが課題
 - 一部の領域で極端に短い時間刻み→大規模並列計算のボトルネック
- 機械学習で時間積分の結果を代替することで短い時間刻みをなくす
 - これまでも分解能が足りない部分は「サブグリッドモデル」で代替されていた
 - より良いサブグリッドモデルとも言える
 - 超新星爆発については動いており、銀河全体の大局的な性質は正しく再現されていそう
- ポスト「富岳」はGPU
 - 一番重い重力計算部分はGPUでの実績が多くあり、すでに動いている
 - Hamada et al. (2009) ゴードンベル賞、Bédorf et al. (2014) ゴードンベル賞ファイナリスト他
 - この銀河の計算では、流体部分はGPUで速くならない
→重力はGPU、流体はCPU