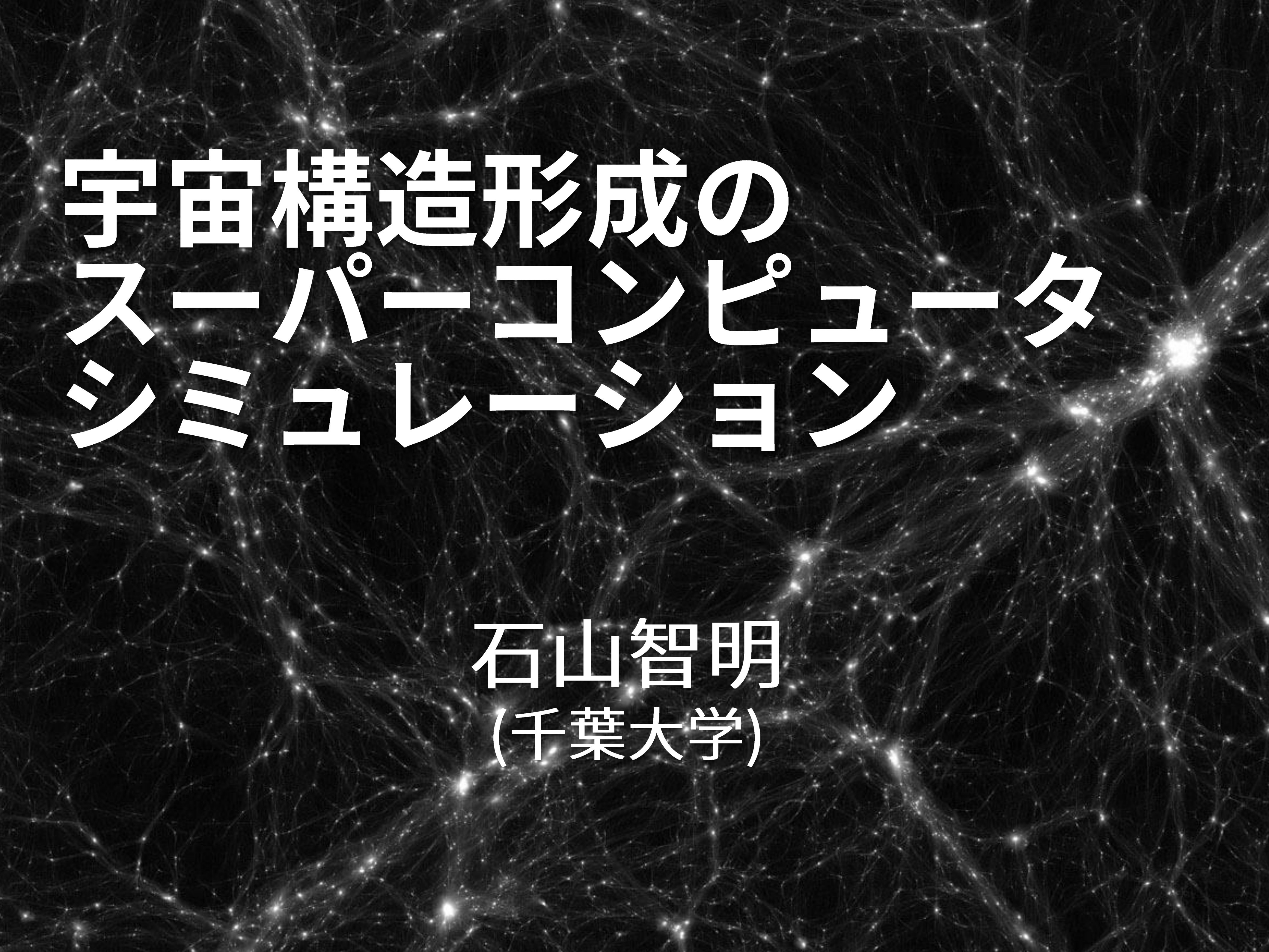


宇宙構造形成の スーパーコンピュータ シミュレーション

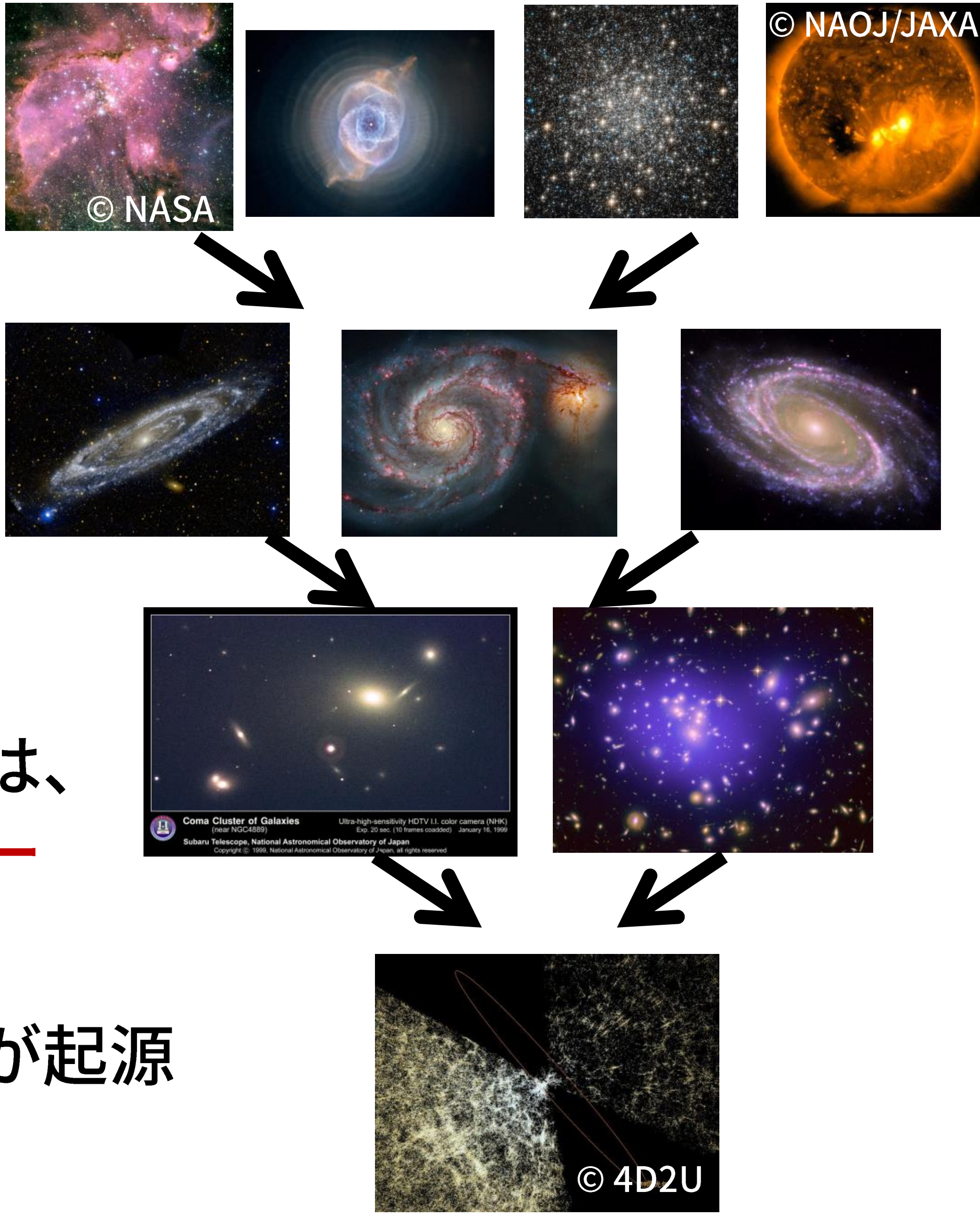
石山智明
(千葉大学)

宇宙の階層構造

- 星の集団 = 銀河
- 銀河の集団 = 銀河団
- 銀河、銀河団の集合 = 宇宙の大規模構造

宇宙の構造は**階層的**

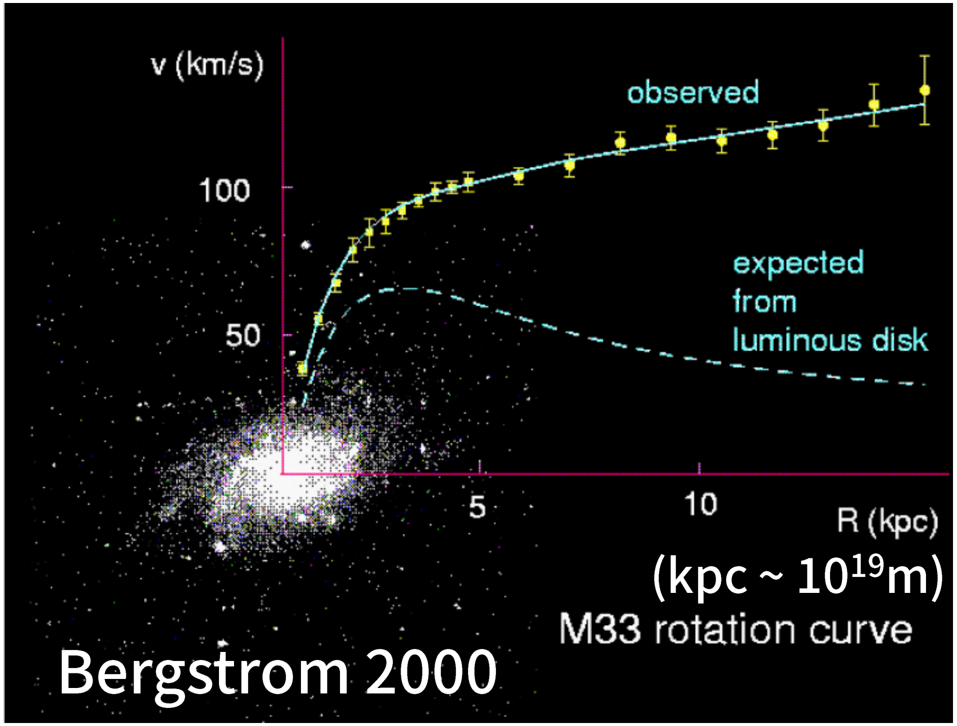
- これらの階層的な構造形成には、重力のみ作用する**ダークマター**(暗黒物質)が必要不可欠
- 宇宙初期の微小な密度揺らぎが起源

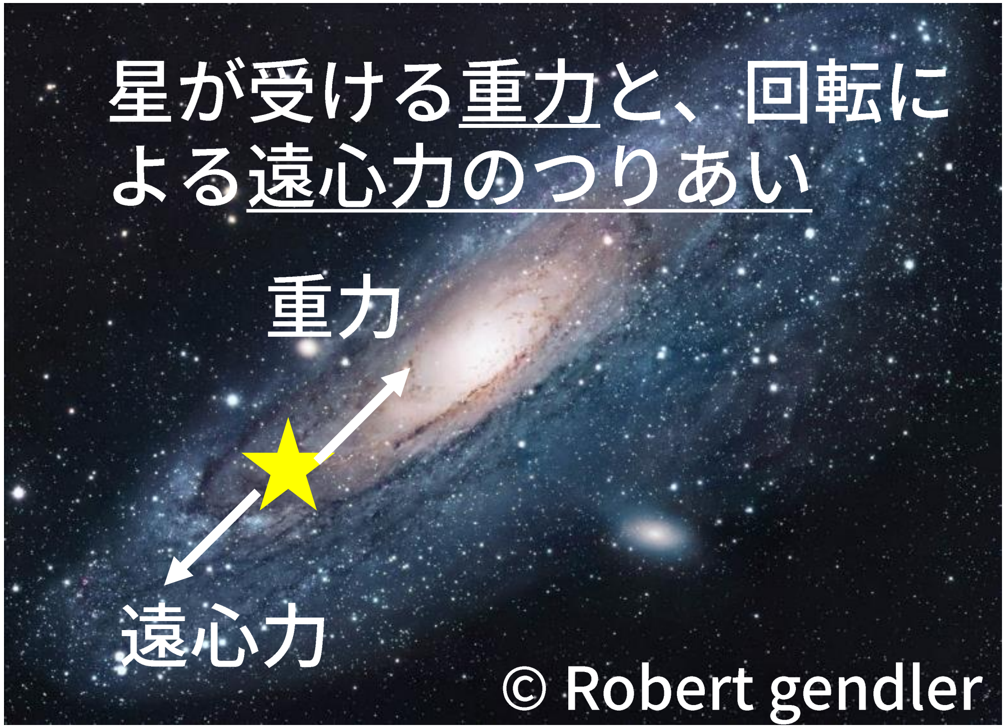


© 2021 Tomoaki Ishiyama, Hirotaka Nakayama, 4D2U Project, NAOJ
https://www.youtube.com/watch?v=R7nV6JEMGAo

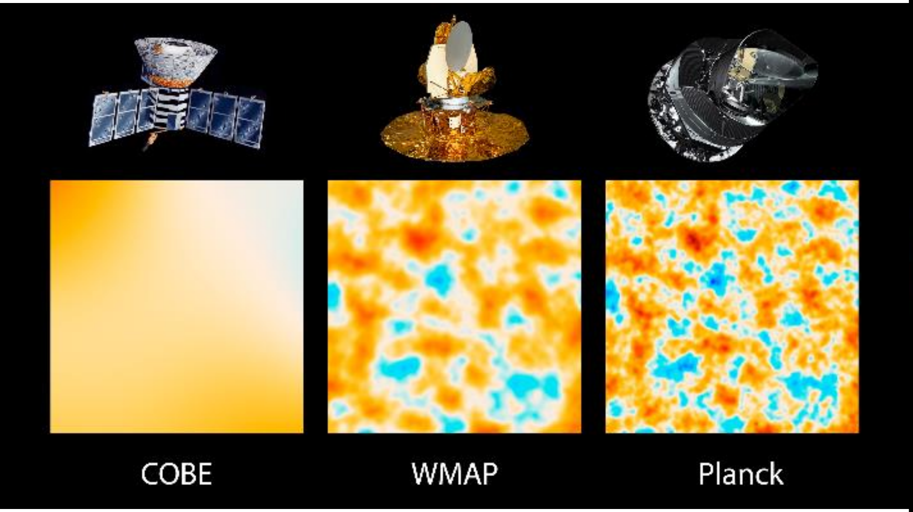
ダークマターの観測的証拠
銀河の星の回転速度

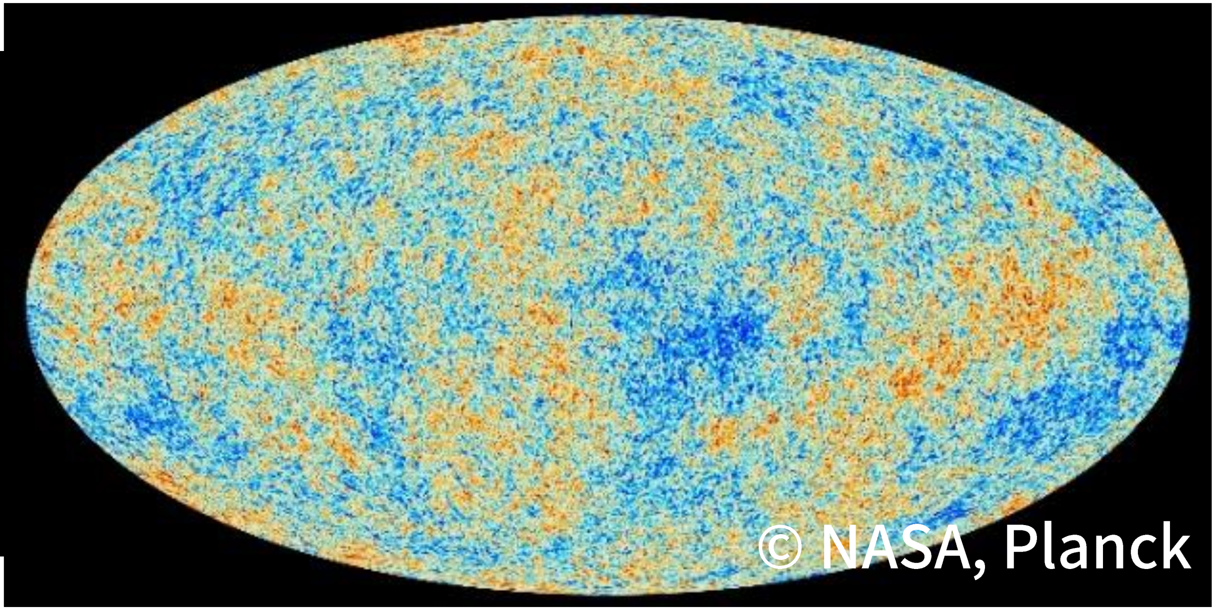
- 銀河の星の回転速度が、観測された物質分布から推定されるものとは大きく異なり、周辺部でも回転速度が低下しない（回転曲線問題, Vera Rubin ら1970年代)
- 目に見えない物質が存在するはずである



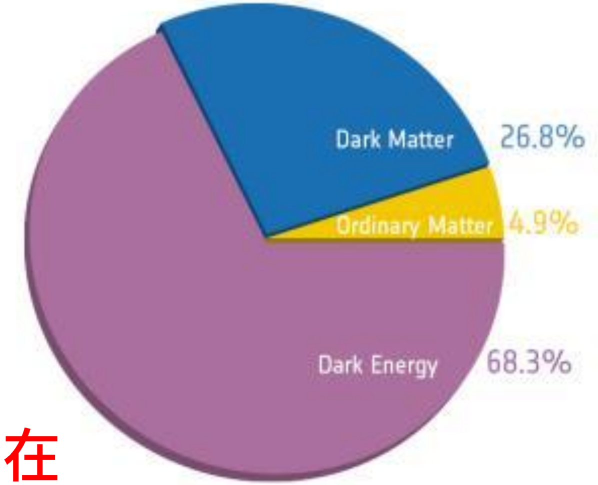


宇宙マイクロ波背景放射





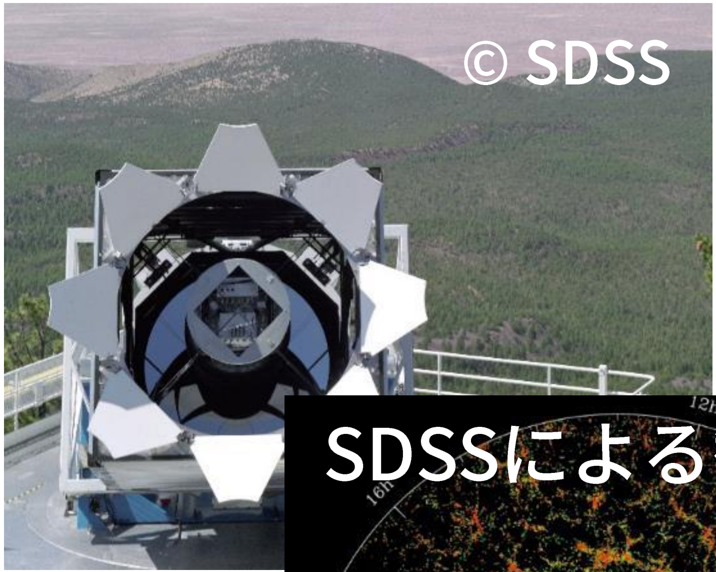
- ビッグバンの観測的事実
- 宇宙全体でほとんど一様だが、10万分の1程度のずれが存在 (宇宙初期の温度ゆらぎに対応する)
- 宇宙初期のさまざまな情報を得られる
    - ダークマターはバリオンに対し、質量で5倍程度存在

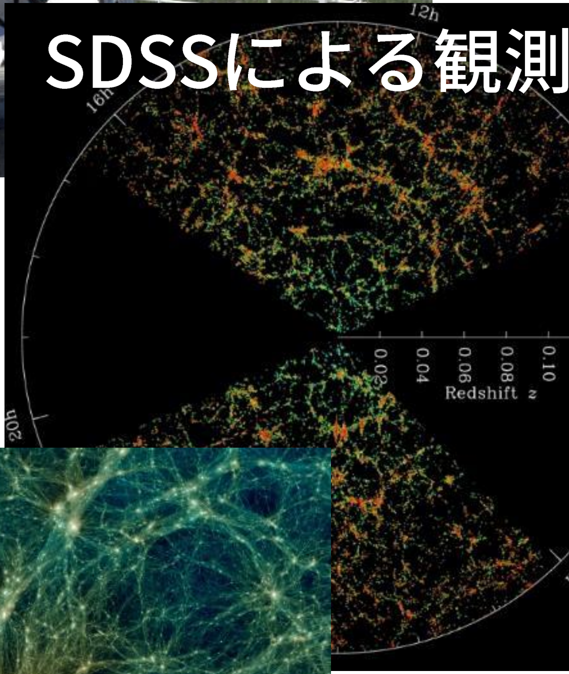


宇宙の大規模構造

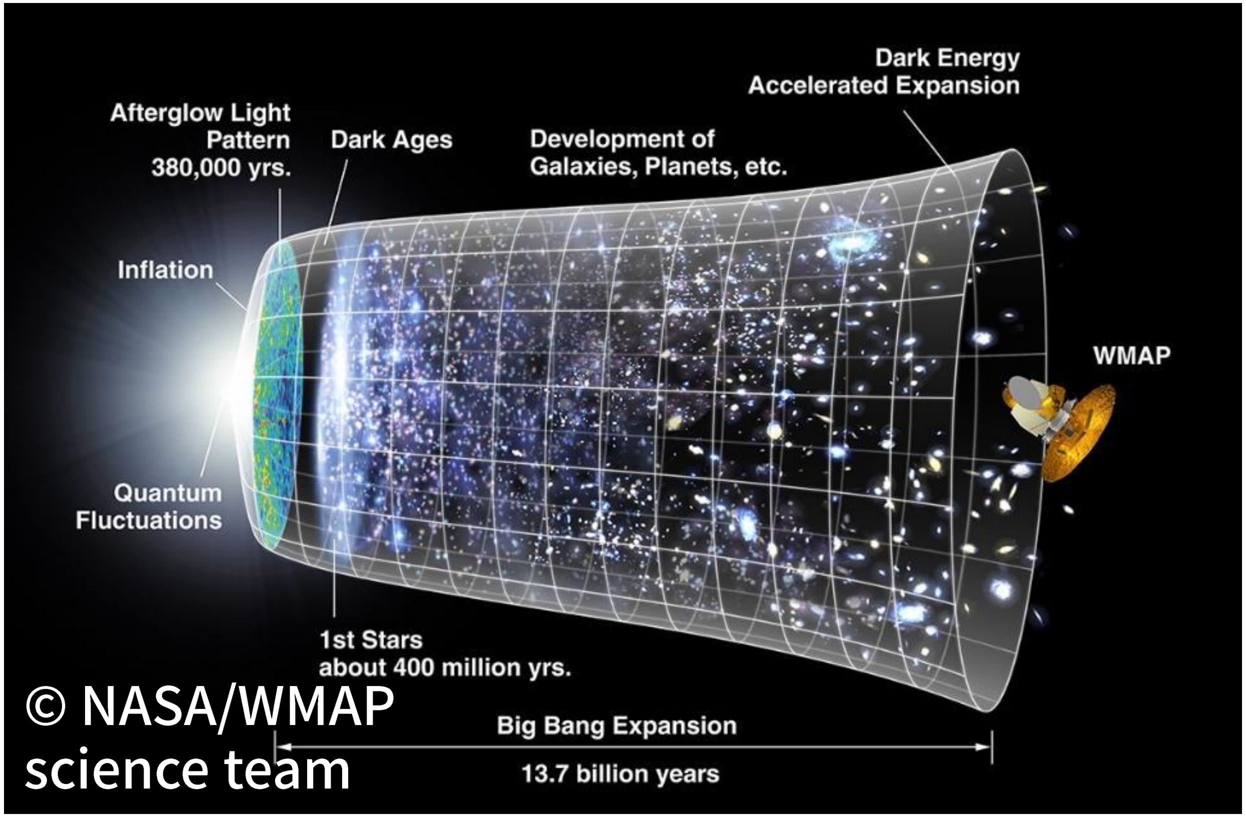
- 宇宙モデルとクラスタリングなど統計的分布は 密接に関連している
- 理論モデルや、モデルに基づいたシミュレーション結果を観測と比較することで、モデルの妥当性を検証することができる

- ダークマターが存在するモデルが強く支持される
- 宇宙年齢で現在観測される構造を作るには、バリオンの重力だけでは不足



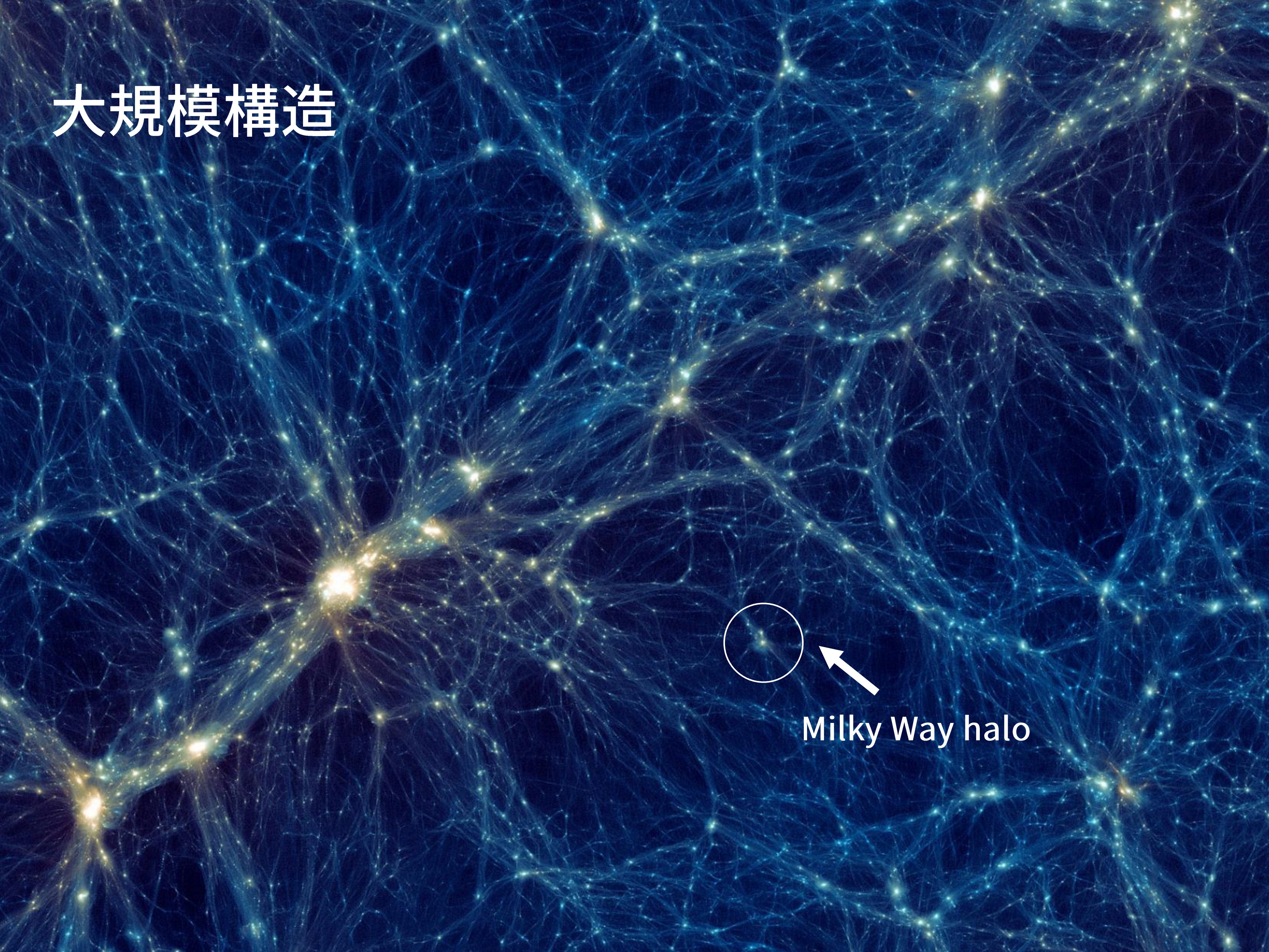


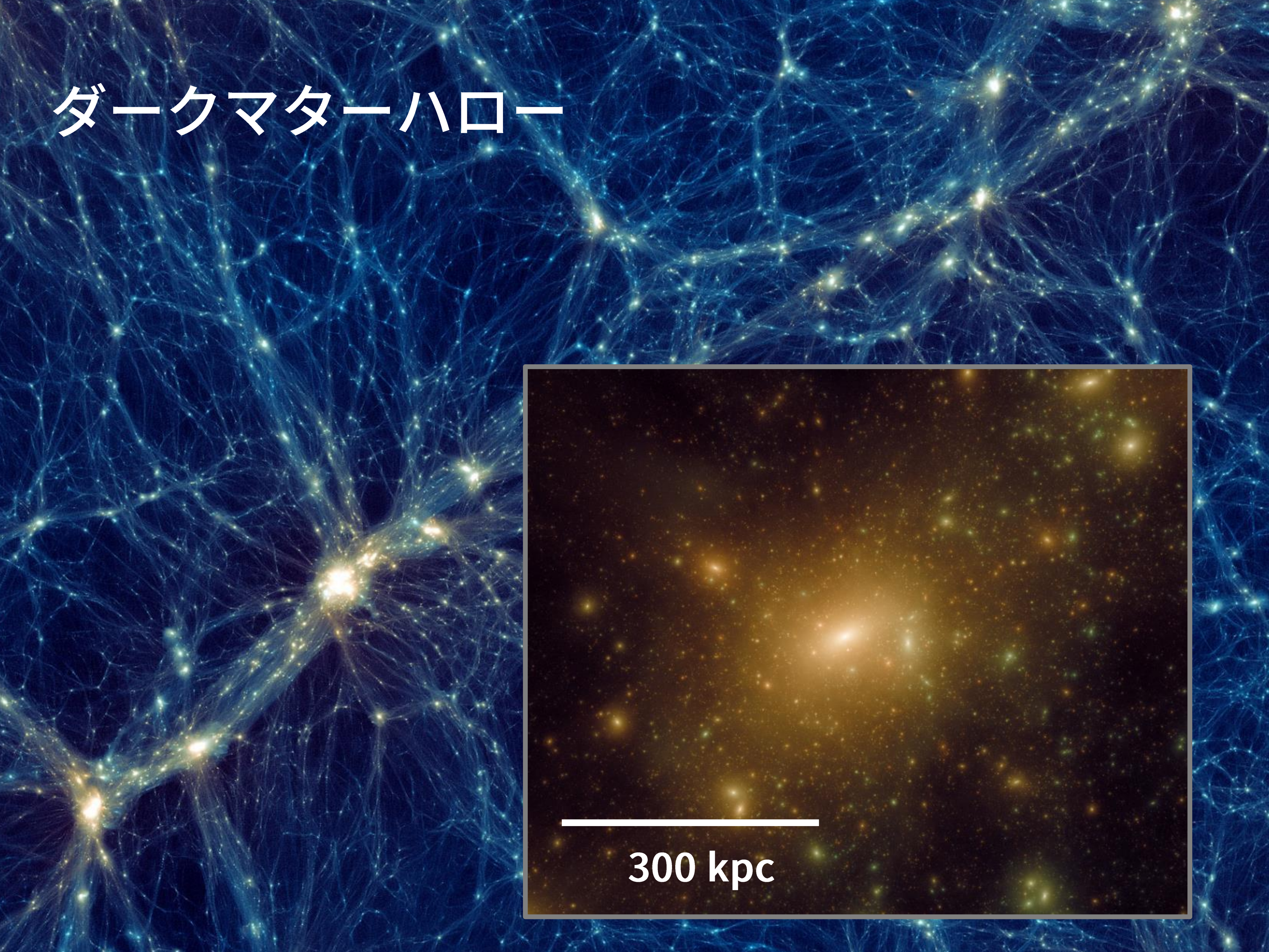
ダークマター構造形成

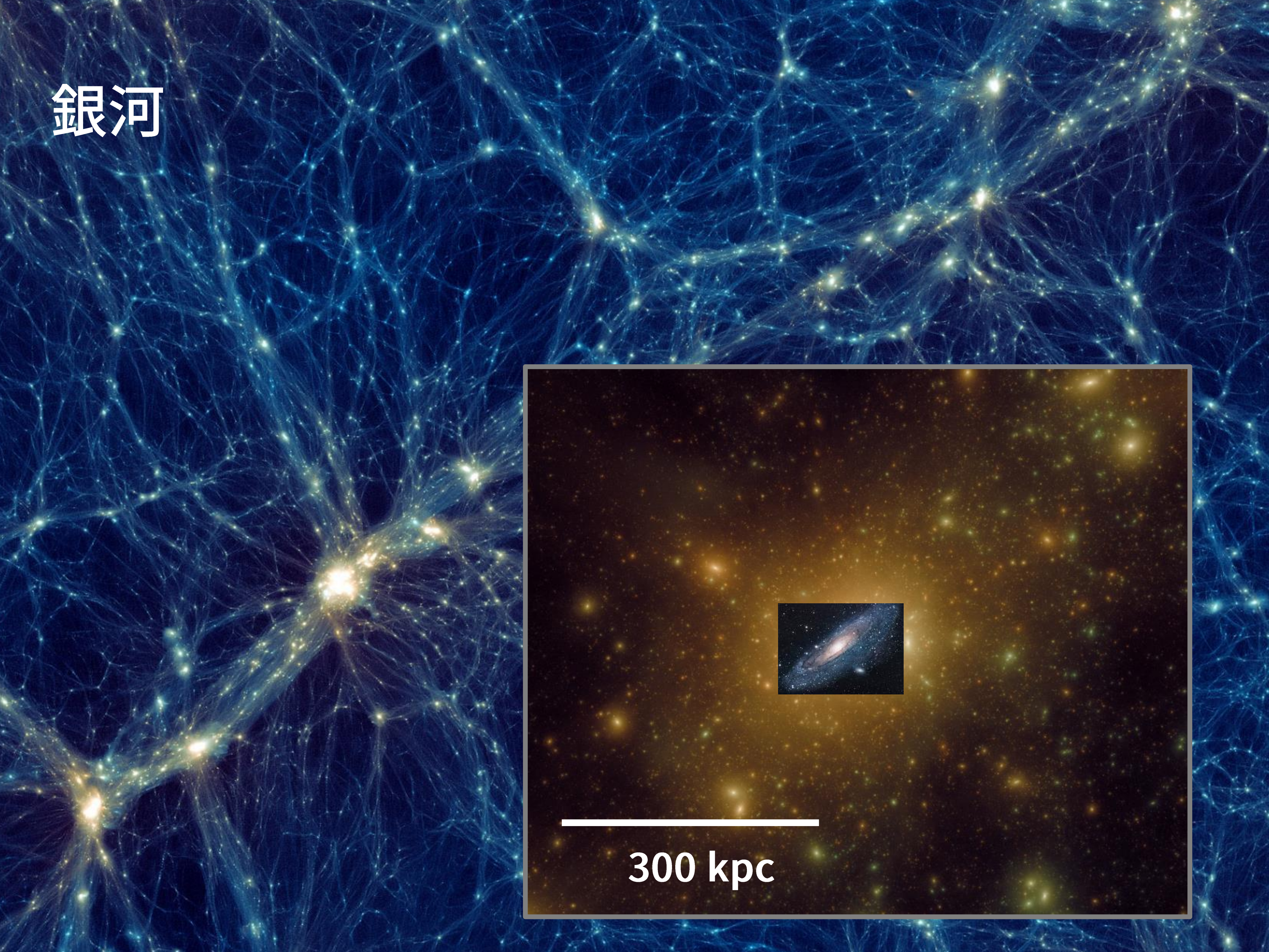


- ダークマター密度ゆらぎの重力崩壊 → ダークマターハローの形成
- ハローの中で誕生する初代星や、第二世代の星がハローとともに群れ集まる → 初代銀河の形成
- 初代銀河同士が合体し、ハローとともに成長 → 銀河の進化、銀河系の形成
- 銀河同士がハローとともに群れ集まる → 銀河団、大規模構造の形成

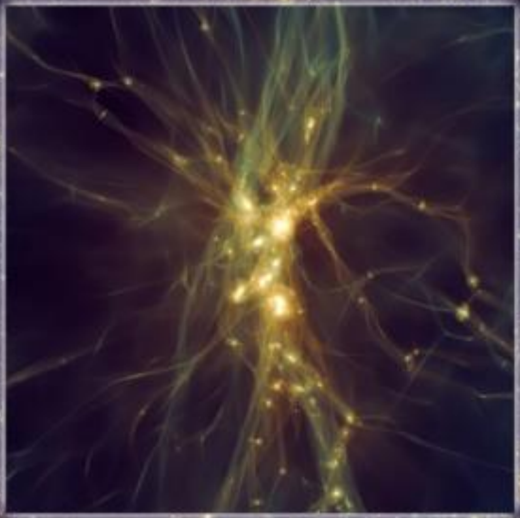
ダークマターハロー形成

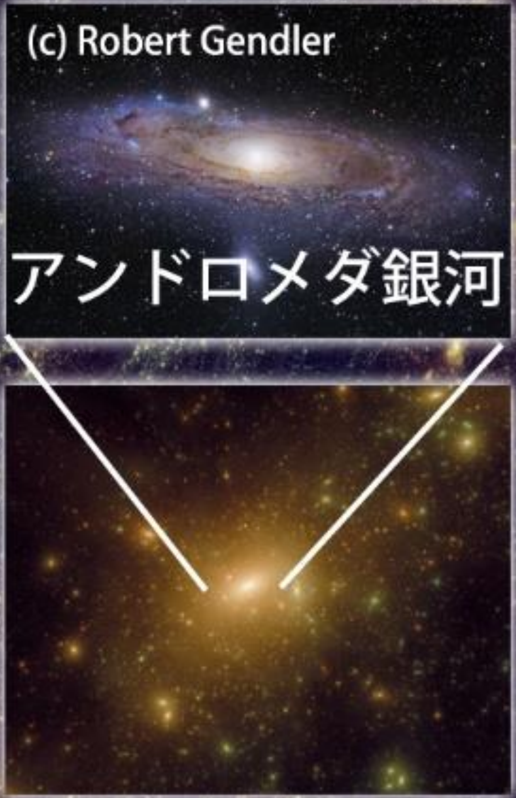

大規模構造
Milky Way halo


ダークマターハロー
300 kpc


銀河
300 kpc

背景：宇宙の大規模構造





初代ハロー　初代星　銀河ハロー　銀河団

<10　<1万　100万　1000万　光年

ダークマターシミュレーション

- ダークマターは光学的に直接観測できない
- ハローの内部構造や空間分布を知るにはシミュレーションをするしかない
  - ハローの空間分布 = 観測量である大規模構造、銀河の分布
  - 内部構造は銀河の形成進化そのものに関連する
- 宇宙の統計的な初期条件は宇宙マイクロ波背景放射の観測などからよく制限されている

ダークマターシミュレーションからわかること

- 宇宙の大域的物質分布 (大規模構造)
  - 各物質の総量や宇宙年齢、初期密度揺らぎの性質など宇宙論的な情報
- ハローの中で生まれるさまざまな天体の形成、進化
  - 銀河形成、進化理論
  - 銀河中心超巨大ブラックホール、活動銀河核の分布
  - 初代星形成、銀河考古学
- ハローの微細構造
  - ダークマター検出

ダークマターハローの構造

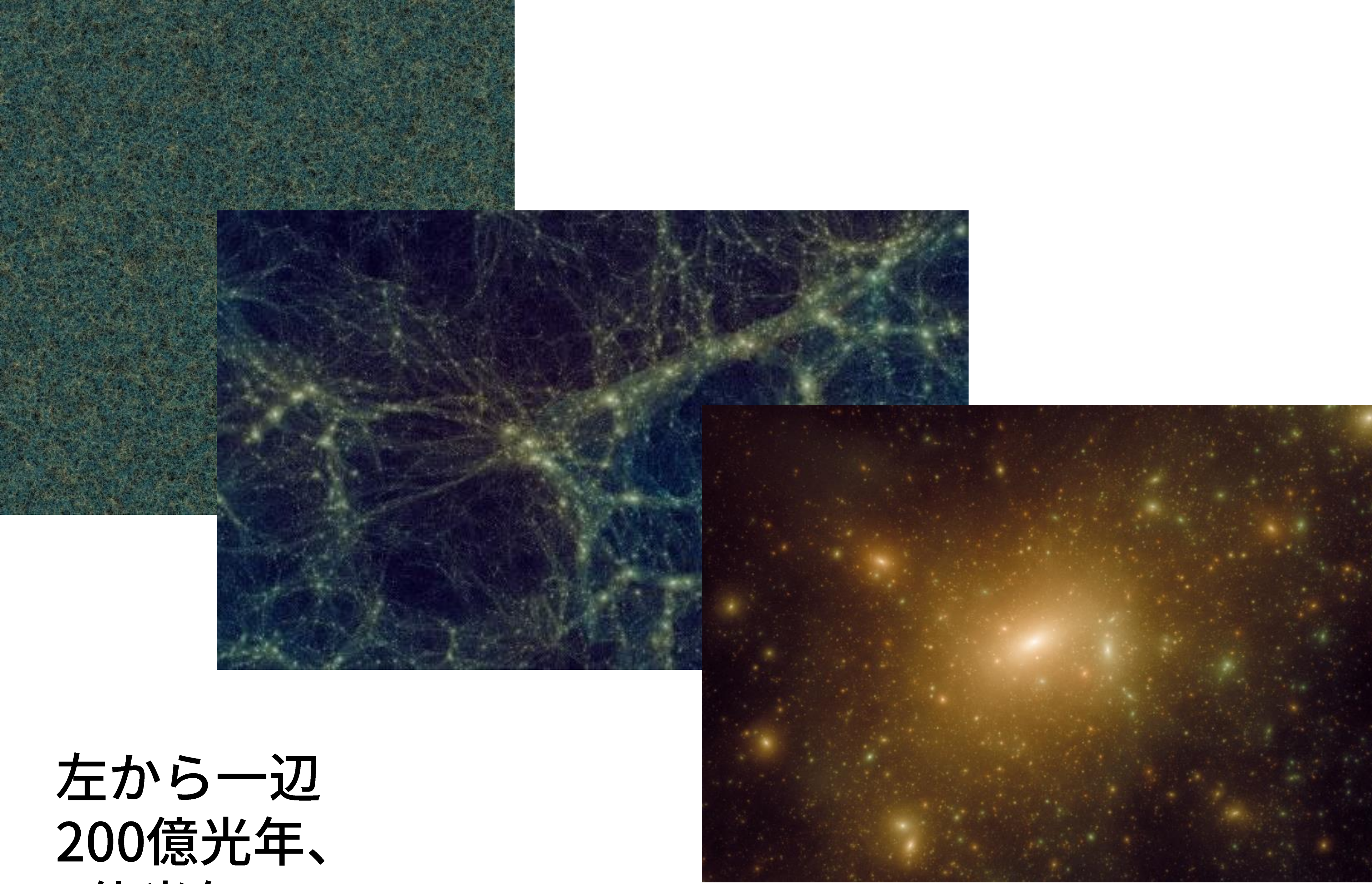
大規模数値
シミュレーションで
はじめて解明
されたこと

中心が高密度
楕円状
無数のサブハローが存在

空間サイズと分解能

- 密度揺らぎを全スケールで分解するには $10^{20\text{-}30}$ 粒子が必要
  - 分解するべきかどうかは別問題

- サイエンスターゲットに合わせて空間サイズと分解能をデザインする
  - 大規模構造がターゲットなら、空間サイズを大きくし、小サイズの銀河や初代星スケールを分解しない
  - 小サイズの銀河や初代星がターゲットなら、空間サイズを小さくし、大規模構造を追わない



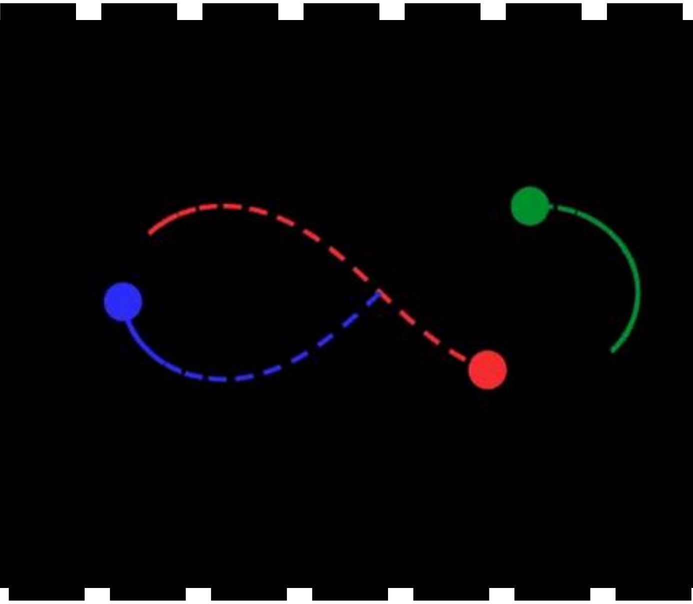
左から一辺
200億光年、
5億光年、
1000万光年

N体シミュレーション

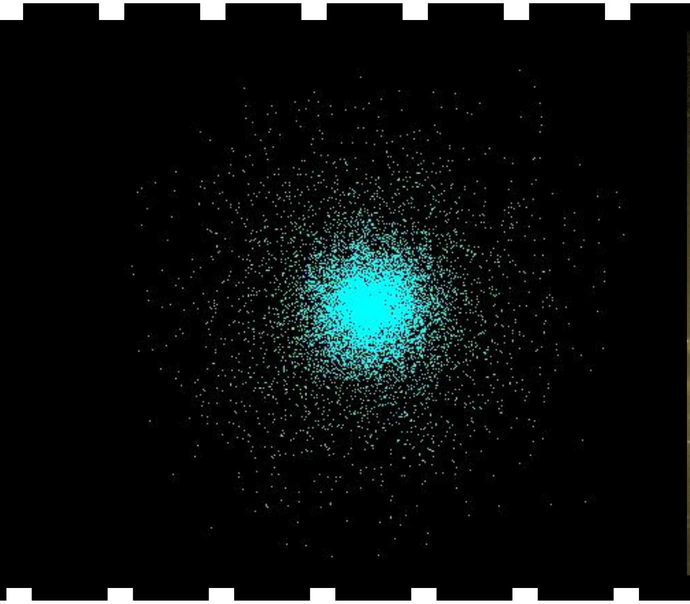
- 粒子法 (ラグランジュ法) の一種
- 物質分布をN個の粒子で表現し、粒子間の重力相互作用を解いて、粒子の運動を追う

$$\frac{d^2 r_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i}^{N} G m_j \frac{r_j - r_i}{|r_j - r_i|^3}$$

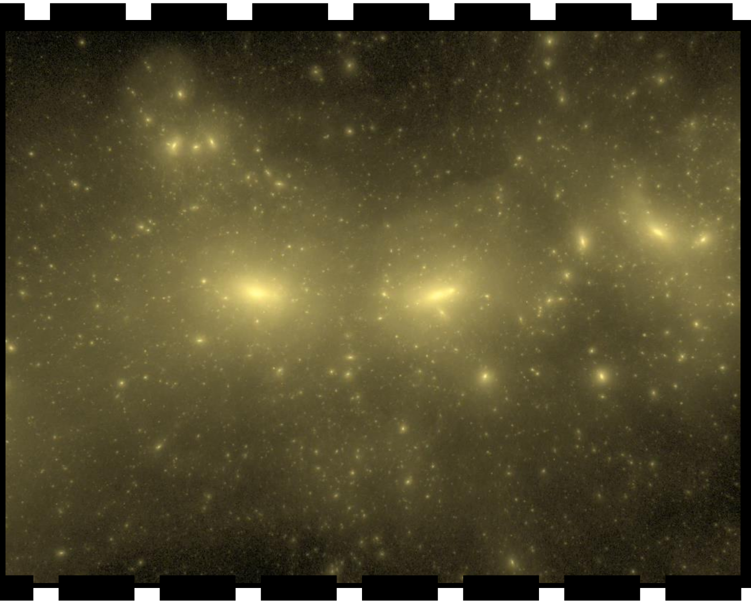
計算量は粒子数の2乗に比例する



粒子=星、惑星
(N=3 : 3体問題)



粒子 = 星、星団
(N=1000: 球状星団)



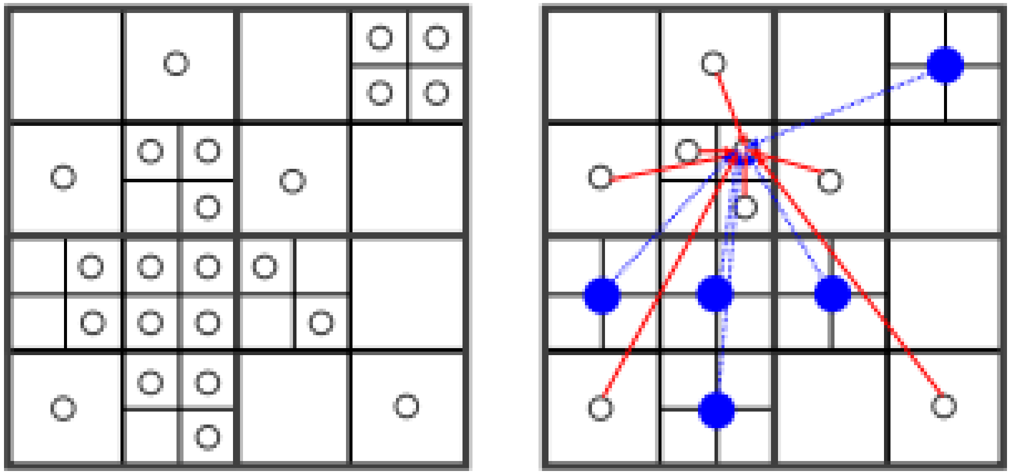
粒子 = ダークマターの塊
(N=1億、ダークマターハロー)

ツリー法

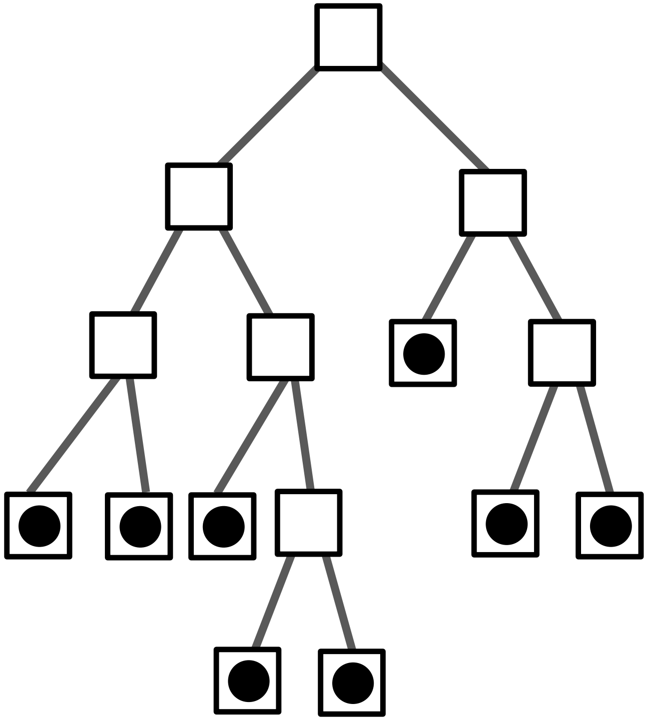
Barnes and Hut 1986

- 遠方の粒子から及ぼされる重力は粒子群からの重力として計算する。近傍の粒子は直接計算
  - O(*N* log *N*) のアルゴリズム
- そのために8分木構造 (3Dの場合) を構築する

2D (4分木) の例

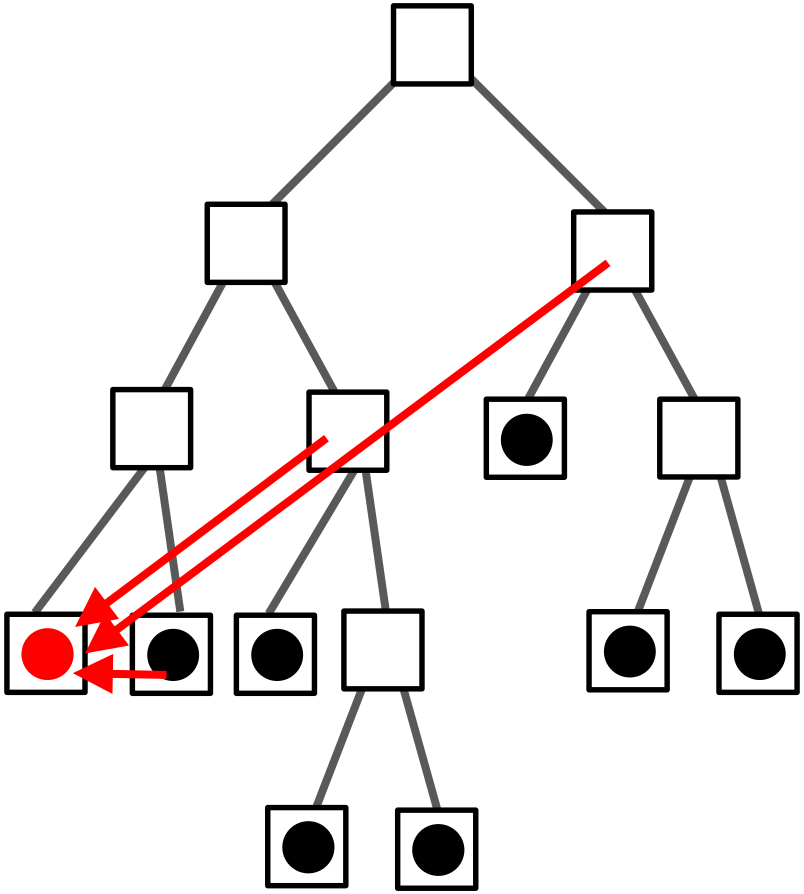


1D (2分木) の例

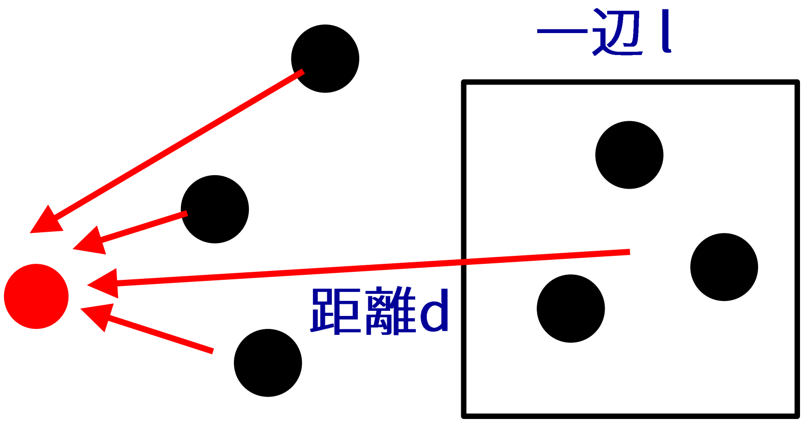


重力計算

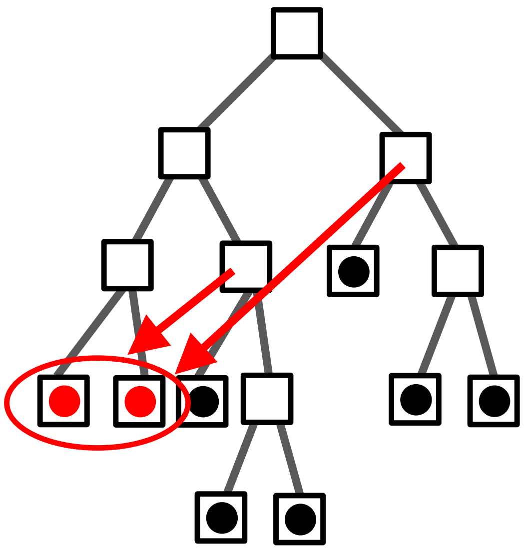
- ツリーをルートから下層にたどる
- 粒子とノードが十分離れていれば ノードの重心(または多重極展開)からの重力として計算
- 離れていなければ直接計算
- 最下層(リーフ)まで再帰的に繰り返す



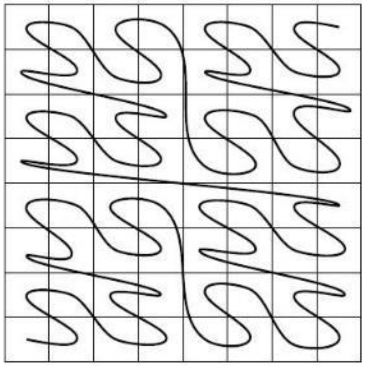
- 十分離れているかの判定にはノードに対する見込み角を用いる
- **l/d < θ** なら十分遠い
  - θは精度パラメータで 0.3〜0.75 にすることが多い

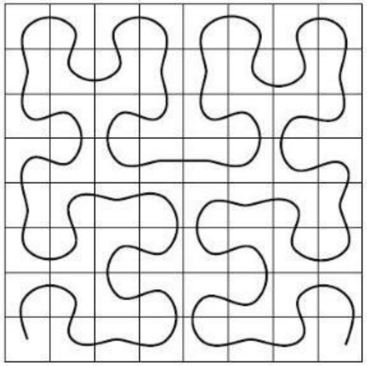


アルゴリズムレベルでの最適化



- 相互作用リストの共有 (Barnes 1990)
  - 複数の粒子で同じ相互作用リストを共有し、リスト作成のコストを大きく下げる
  - 最適値は計算環境によるが100〜数千粒子くらいで共有すると一番速いことが多い
- ツリー構造を最下層まで構築しない
  - 10個とか適当な粒子数になったところでツリーの再帰的構築を打ち切る
  - ツリー構造構築時間の短縮とメモリの節約
- 空間充填曲線に沿ってあらかじめ粒子を並べておく
  - メモリアクセス最適化





左: morton ordering
右: peano-Hilbert curve
(Warren et al. 1993)

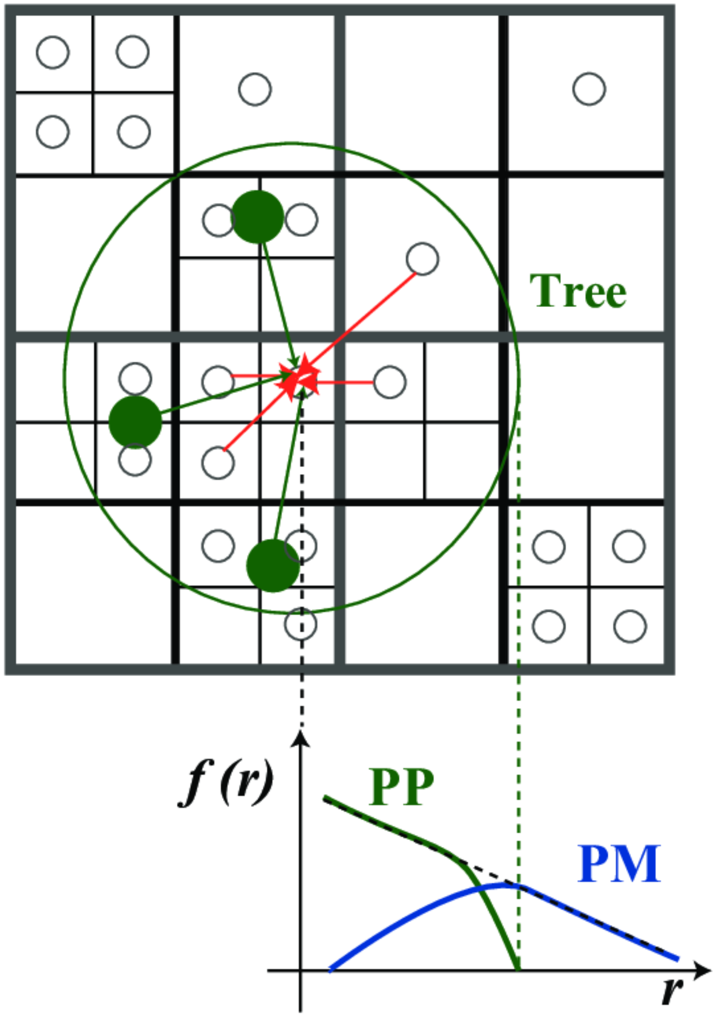
弱点

- 粒子分布が一様に近い場合
  - 距離 r にある粒子群からの重力 ∝ r^{-2}
  - 距離 r にある粒子の数 ∝ r^2
- → ネットの重力が距離 r に依存しない
  → ツリー法の近似の影響が強く出てしまう

- 対策
  - θを小さくする
  - 四重極以上も計算する
  - 遠距離力はツリー法以外で計算する (Particle-Mesh など)

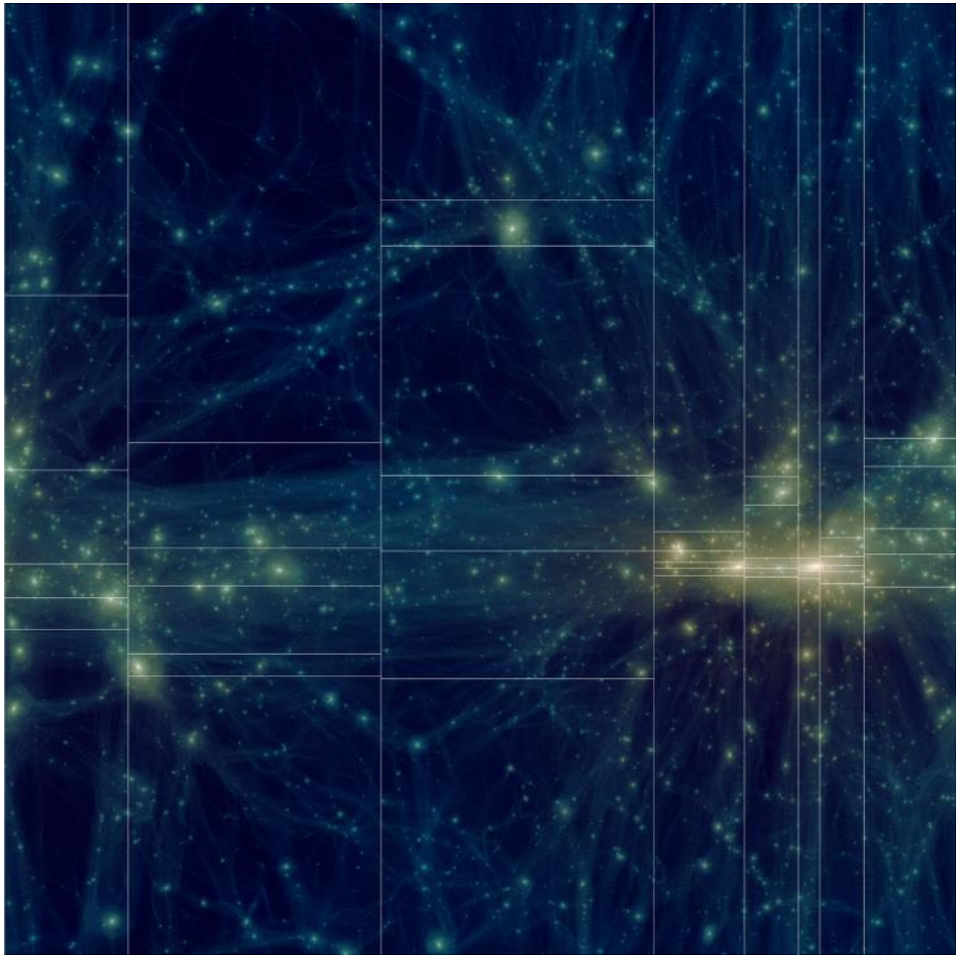
Ishiyama+ 2009, 2012, 2022

TreePM コード GreeM



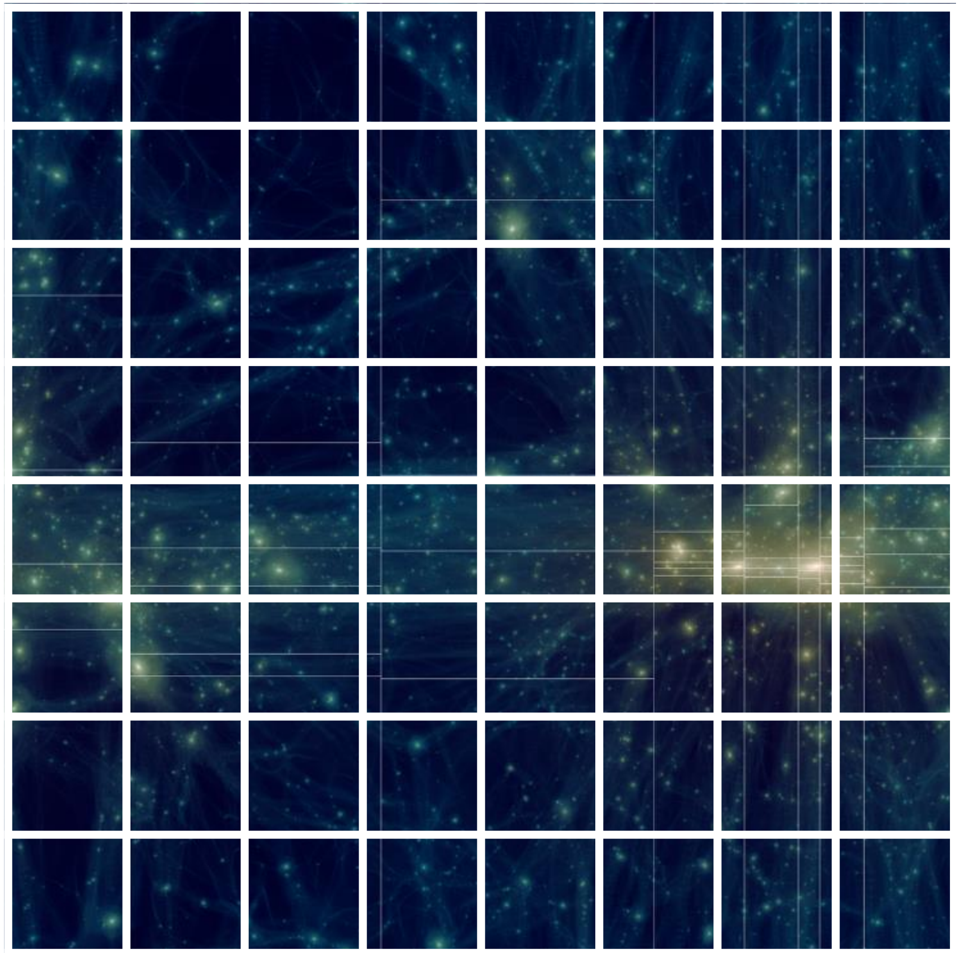
- Massively parallel TreePM code
  - カットオフ付き近距離力: ツリー法
  - 長距離力: Particle Mesh 法
- 数百万コア並列までよくスケールする
- SC12 Gordon Bell Prize
- 業界で標準的な公開コード、“Gadget-2” (Springel 2005) より2-10倍速い
- 「京」での実行効率は最大50%台
  - 重力相互作用演算カーネルの手動 SIMD 化が効いている
- 「富岳」でも最適化されている

粒子の領域分割



近距離力計算 (主要演算部)の最適化、
ロードバランスの最適化のため、
高密度領域を細分化

FFT (PM) の領域分割

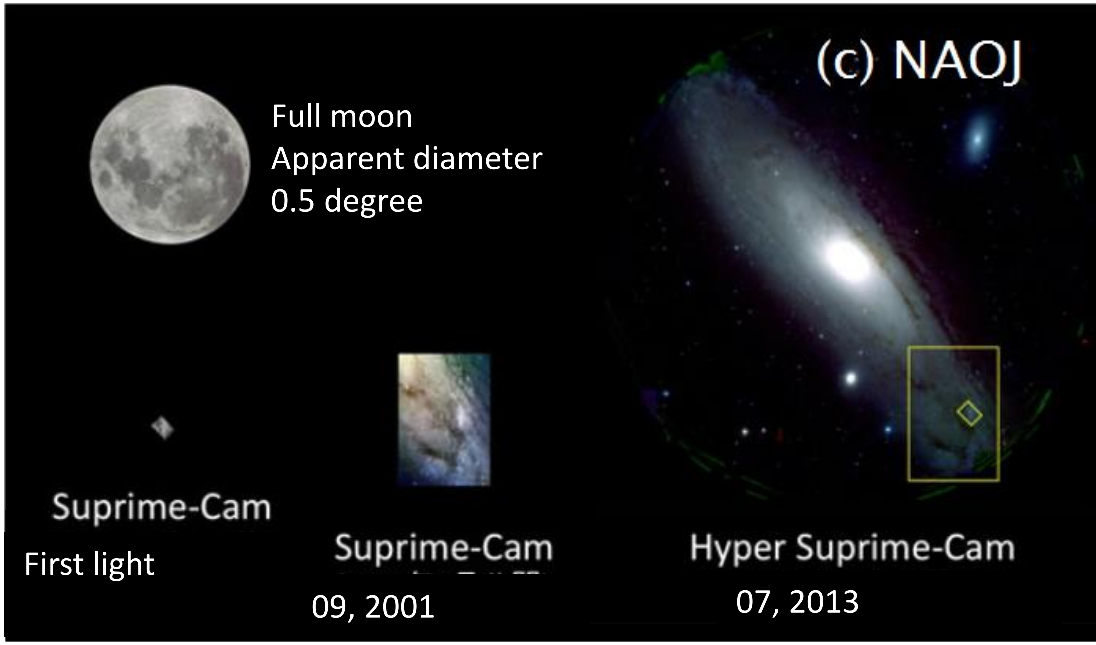


- 大抵の FFT library では、各領域のグリッド数が等しいと一番性能が出る
- FFTW の場合は 1D slab 分散、富岳には SSL II MPI の3D分散並列 FFT library がある

Next generation mock galaxy/AGN catalogs

- 近年の大規模サーベイ (HSC, PFS, Euclid, JWST など) は途方もない数の銀河や活動銀河核を対象とする
  - 1Gpc を超える観測領域
  - 個数密度が $< 10^{-6}$ Mpc^{-3} と小さな、明るい活動銀河核など高赤方偏移のレア天体

→ Gpc scale mocks



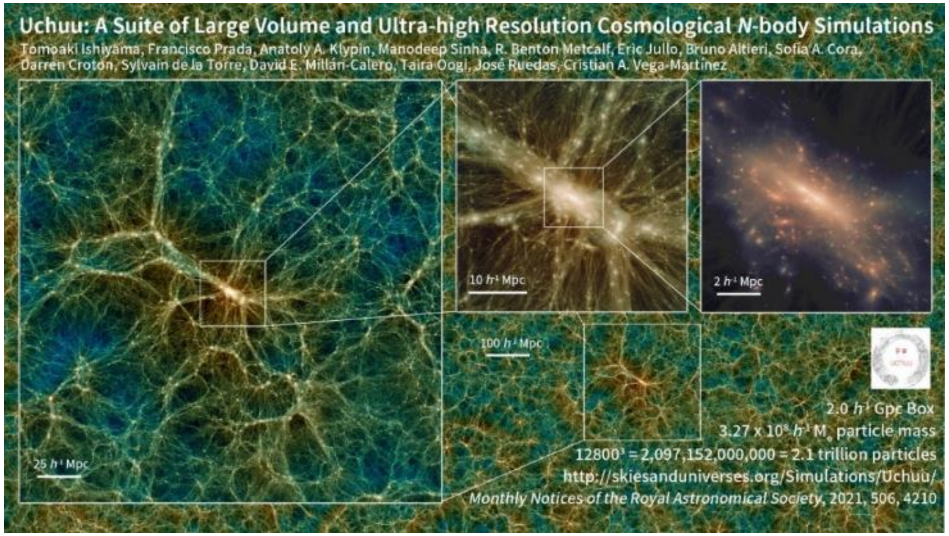
→ **大規模シミュレーション** が模擬カタログを構築するのに必要

- 宇宙論的流体シミュレーション (~100 Mpc scale)
- **ダークマターの大規模宇宙論的N体シミュレーション (~Gpc scale) +**
  - 経験モデル (UniverseMachine, HOD, Abundance matching)
  - 準解析的銀河・活動銀河核形成モデル

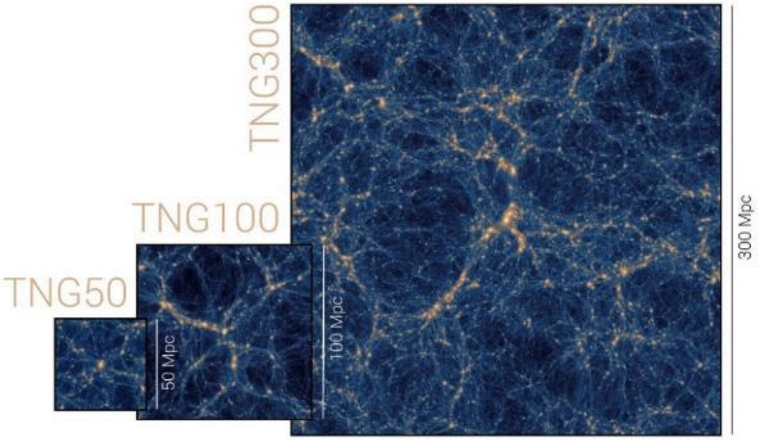
Big numerical challenge

DM only simulations

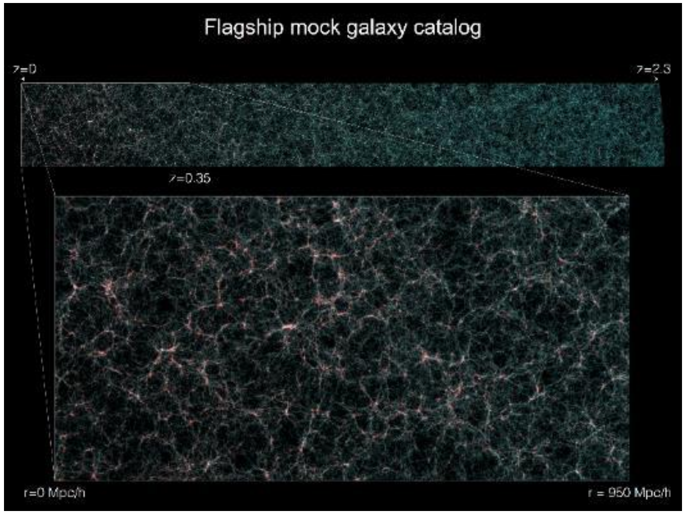
Hydro simulations



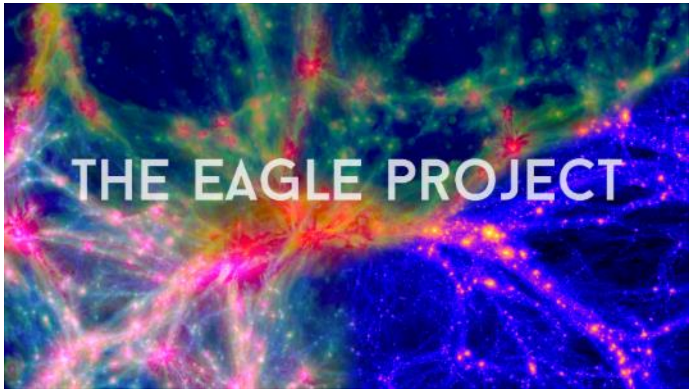
Uchuu simulation



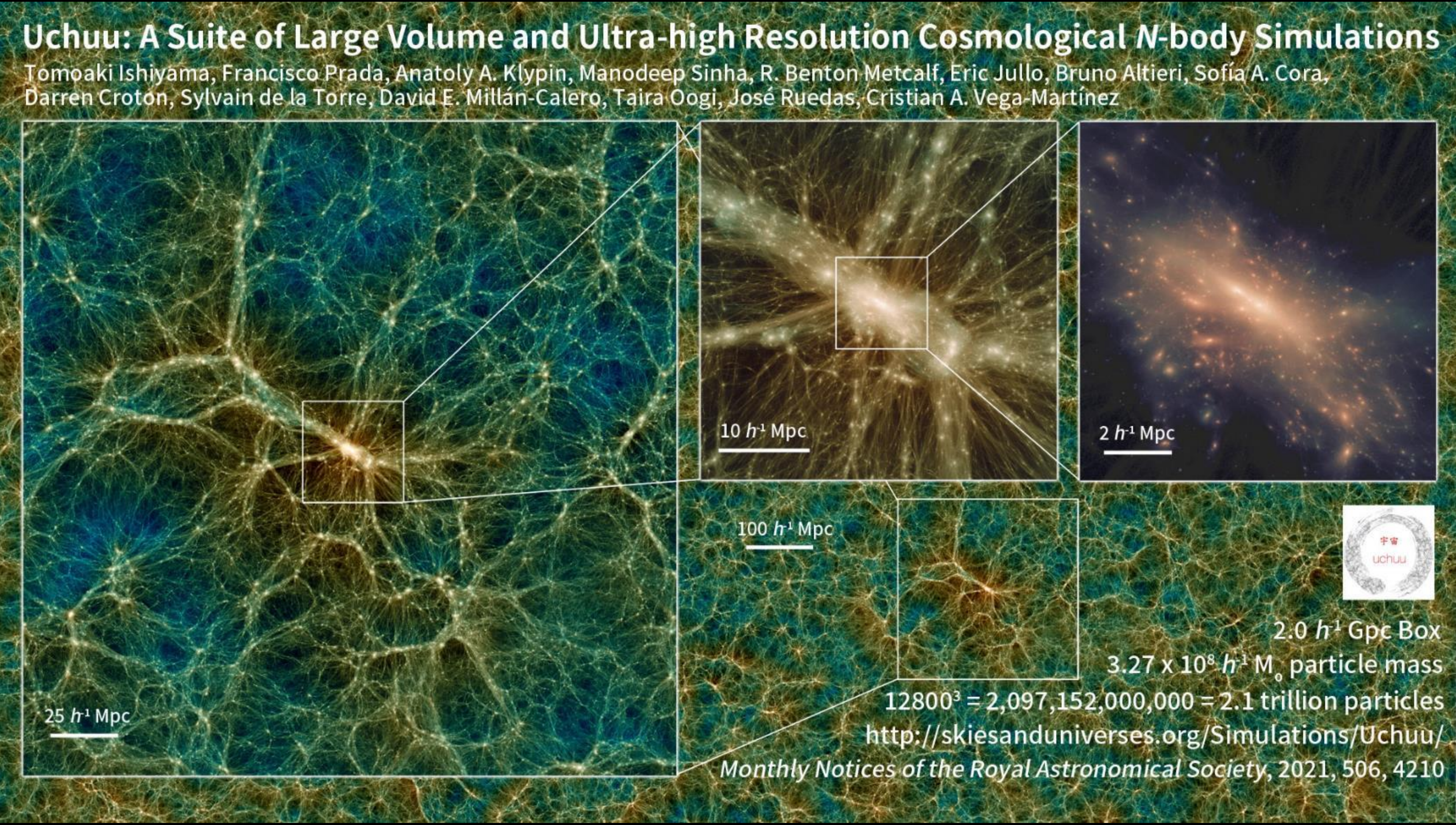
Illustris TNG simulation



Euclid Flagship simulation



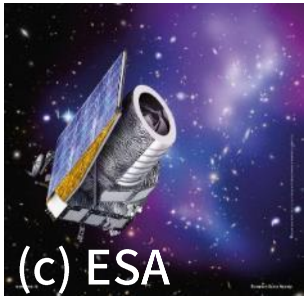
EAGLE simulation



Uchuu high-resolution images:
http://hpc.imit.chiba-u.jp/~ishiymtm/UchuuPress/

プロジェクト概要

- 超大規模宇宙論的ダークマター構造形成シミュレーションを行い、ハロー、銀河、活動銀河核のカタログを構築、公開する
- 次世代の大規模天体サーベイと比較



- さまざまなモデルを用いて複数のカタログを構築する
  - ν^2GC, SAGE, SAG
  - UniverseMachine, HOD, SHAM

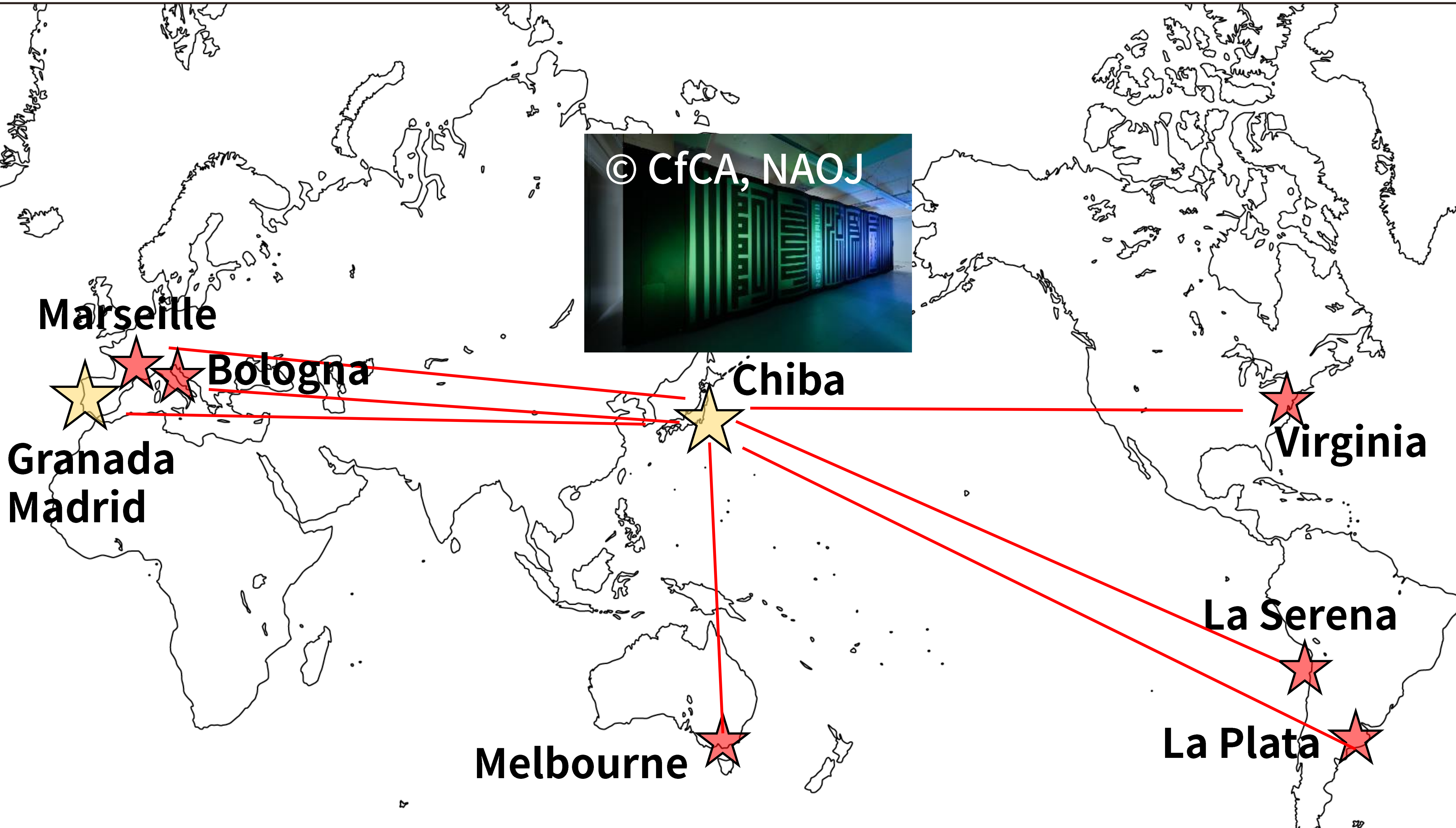
Core member

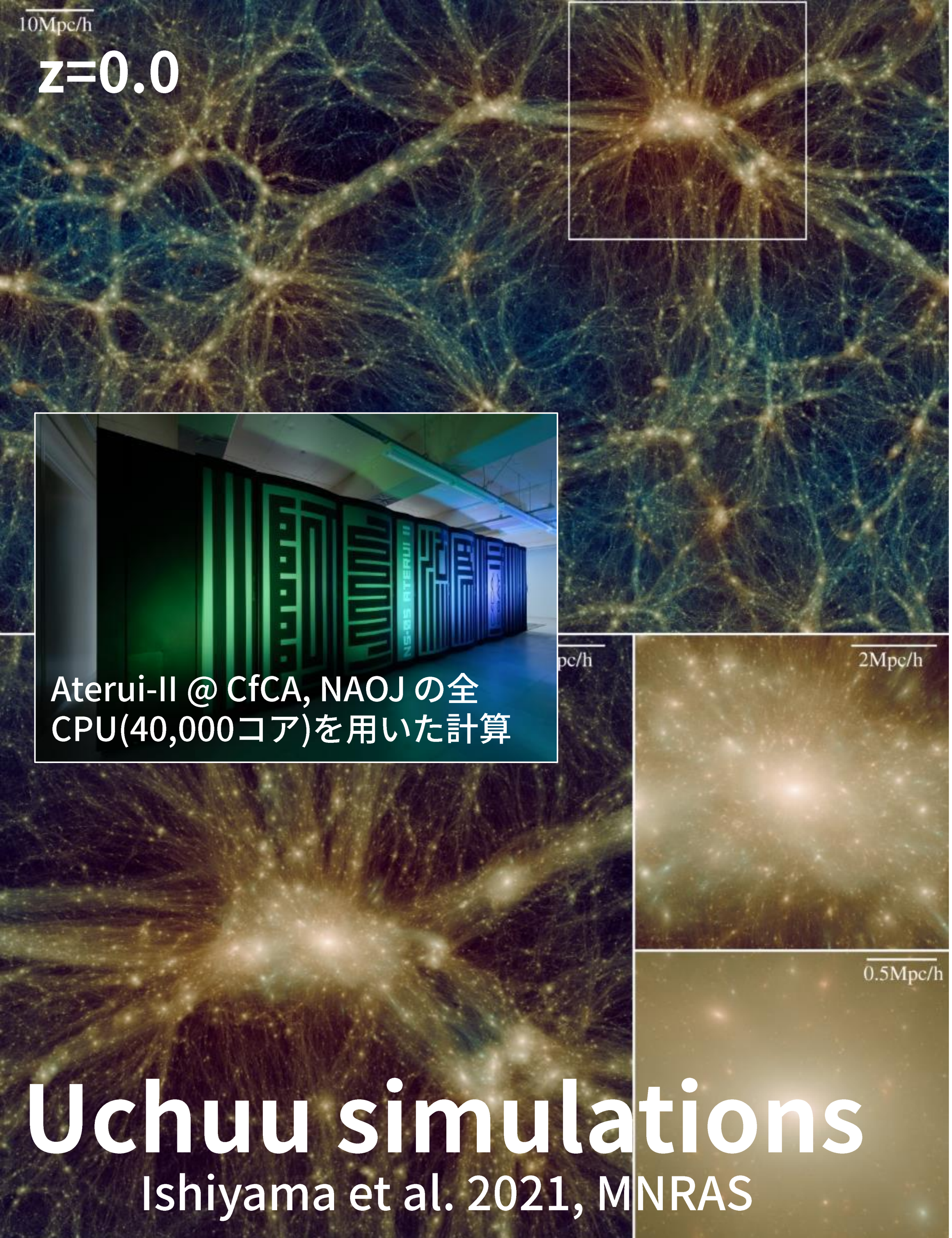
- Bruno Altieri (ESAC) *
- Sofia Cora (La Plata) *
- Darren Croton (Melbourne) *
- Sylvain De la Torre (Marseille)
- Tomoaki Ishiyama (Chiba) **
- Eric Jullo (Marseille) *
- Anatoly Klypin (Virginia) *
- Ben Metcalf (Bologna)
- Julia F. Ereza (Granada)
- Taira Oogi (Chiba)
- Francisco Prada (Granada) **
- Manodeep Sinha (Melbourne)
- Cristian Vega (La Serena)
- and many other collaborators

** Co-PI, * core board

Worldwide collaboration based on simulations conducted on Japanese supercomputers

☆ Core member & data mirror   ★ Core member





Uchuu simulations

Ishiyama et al. 2021, MNRAS

Name	N	L (h^{-1}Mpc)
Uchuu	12800^3	2000.0
mini-Uchuu	2560^3	400.0
micro-Uchuu	640^3	100.0
Shin-Uchuu	6400^3	140.0

最大粒子数= $12{,}800^3$ =
2,097,152,000,000

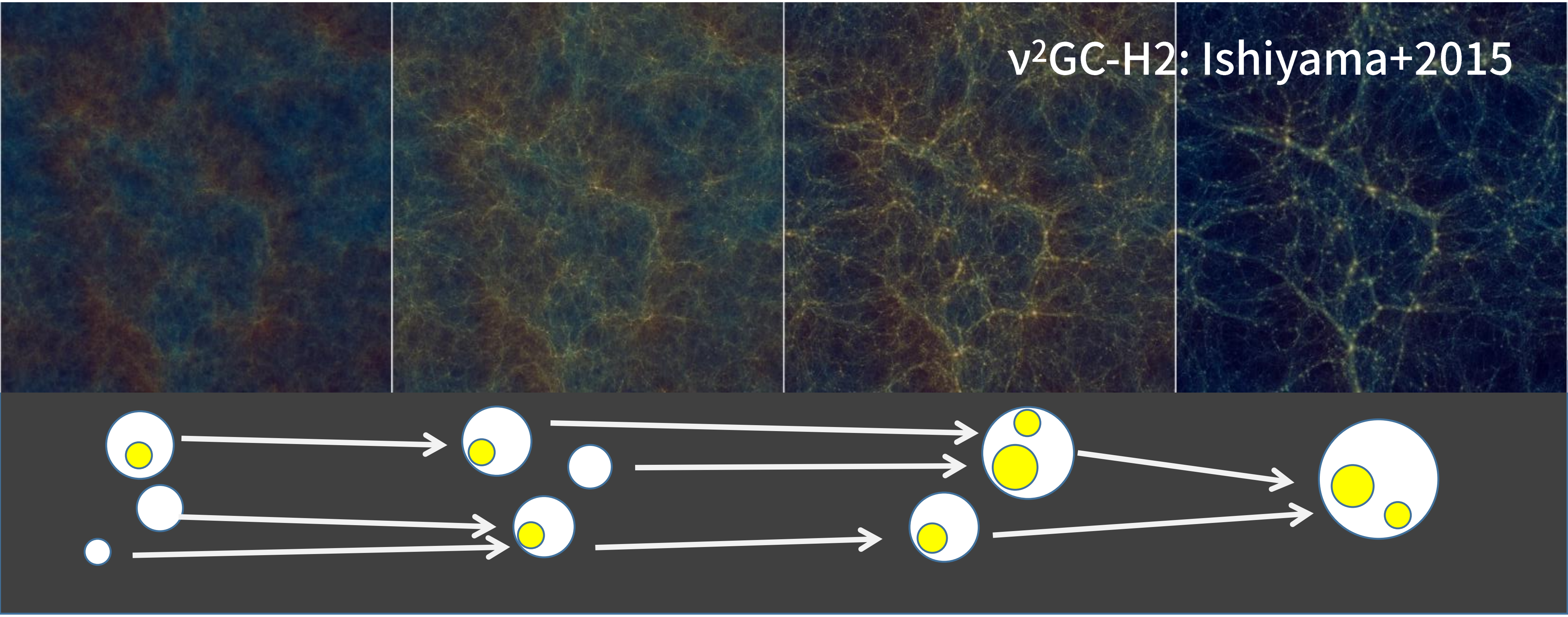
m_{Uchuu} = 3.27 x 10^8 Msun/h
$m_{ShinUchuu}$ = 8.97 x 10^5 Msun/h

Planck Cosmology

データサイズ (50 snapshots):
粒子 : ~2PB
Merger tree: ~30TB (HDF5)

64 x larger volume,
3 x better mass res, compared to
Millennium Run
(WMAP1 cosmology)

merger tree



- ダークマター密度揺らぎの非線形成長を有限のボリューム、質量分解能の下でシミュレーション
  - 各時刻におけるハロー/サブハローの質量、内部構造、運動といった特徴を記述する多数のパラメータに縮約した情報 (ハローカタログ)
  - それらを時刻間でつなぎ合体など進化の情報を記述する merger tree

データ公開 (merger tree)

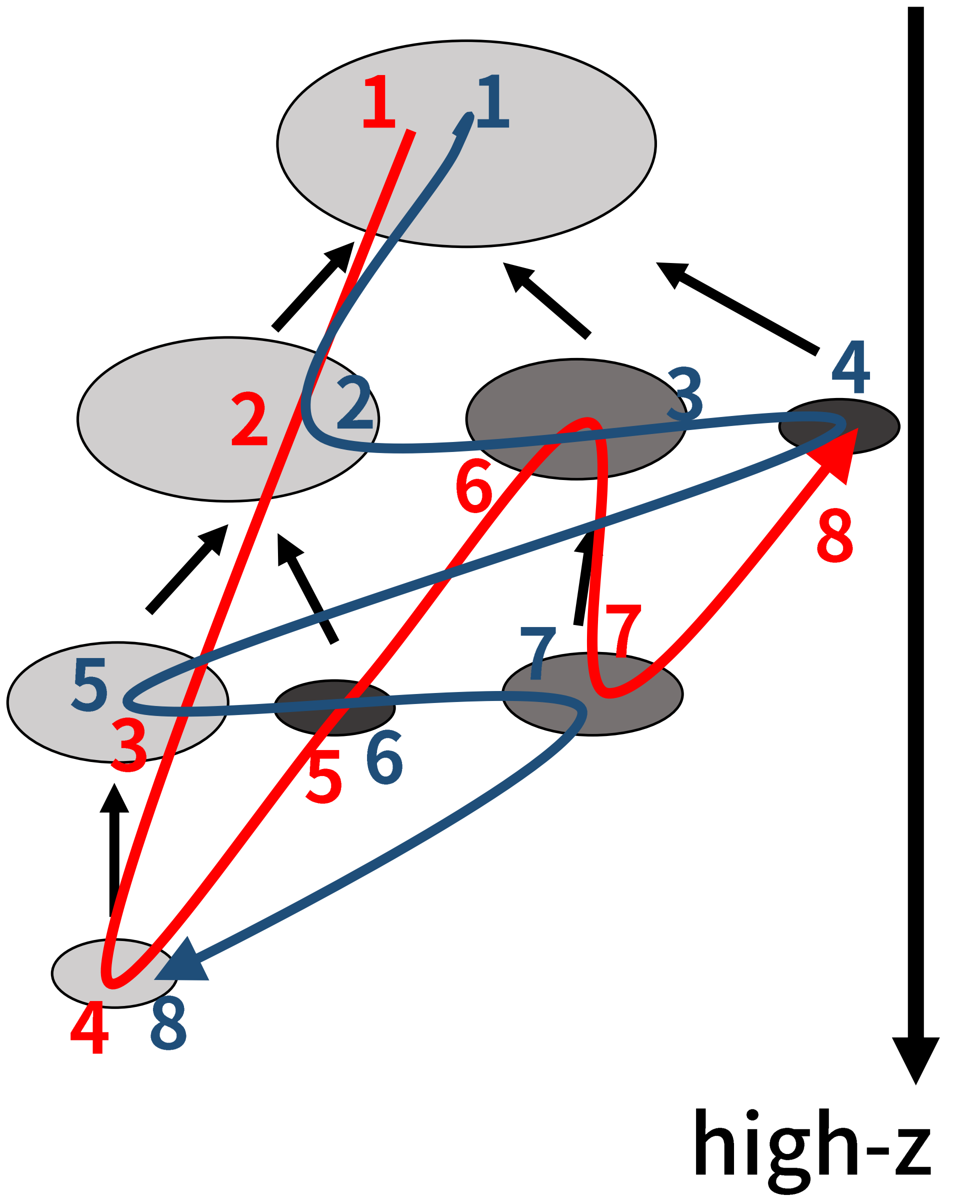
- 典型的な宇宙論的シミュレーションでは、総ステップ数は数千〜数十万
- 例えば粒子数1000億なら、データサイズは 3TB/step 程度。それを全ステップで保存するわけにはいかない
  - 総データサイズが数ペタ〜数百ペタになってしまう

- ハロー/サブハローは粒子の集合体なので、粒子と比べると格段にデータサイズを小さくできる
- merger tree の時間ステップ数は、典型的には50〜200
  - (サイエンスに問題のない範囲内で)時間解像度を下げている

  → ステップ数の削減、データ量の削減

merger history の構造

- num_prog
  - progenitor の数
- **desc_id**
- **Breadth_first_ID**
- **Depth_first_ID**
- Last_mainleaf_depthfirst_ID
  - Main branch の最初のハロー ID
- Tree_root_ID
  - 最終時刻のハローID



http://skiesanduniverses.org/Simulations/Uchuu/

DR1

- **Uchuu (~100TB)** **released on July 28th, 2020**
  - Rockstar halo/subhalo catalogs (including Vpeak, Vacc, Mpeak)
    - No mass cut (36 TB)
    - Only halos/subhalos with $M_{200c} > 10^{11}$ Msun/h (5.5 TB)
    - Only halos/subhalos with $M_{200c} > 10^{12}$ Msun/h (508 GB)
  - Merger trees (26 TB)
  - Random sample of particles (0.5%, 320GB/redshift, Gadget-2)

- **Shin-Uchuu (~16TB)**
  - Rockstar halo/subhalo catalogs (including Vpeak, Vacc, Mpeak)
    - No mass cut (4.3 TB)
    - Only halos/subhalos with $M_{200c} > 10^{9}$ Msun/h (189 GB)
  - Merger trees (2.7 TB)
  - Random sample of particles (1.6%, 131GB/redshift, Gadget-2)

HDF5 files are provided

他との比較

少数大規模シミュレーション

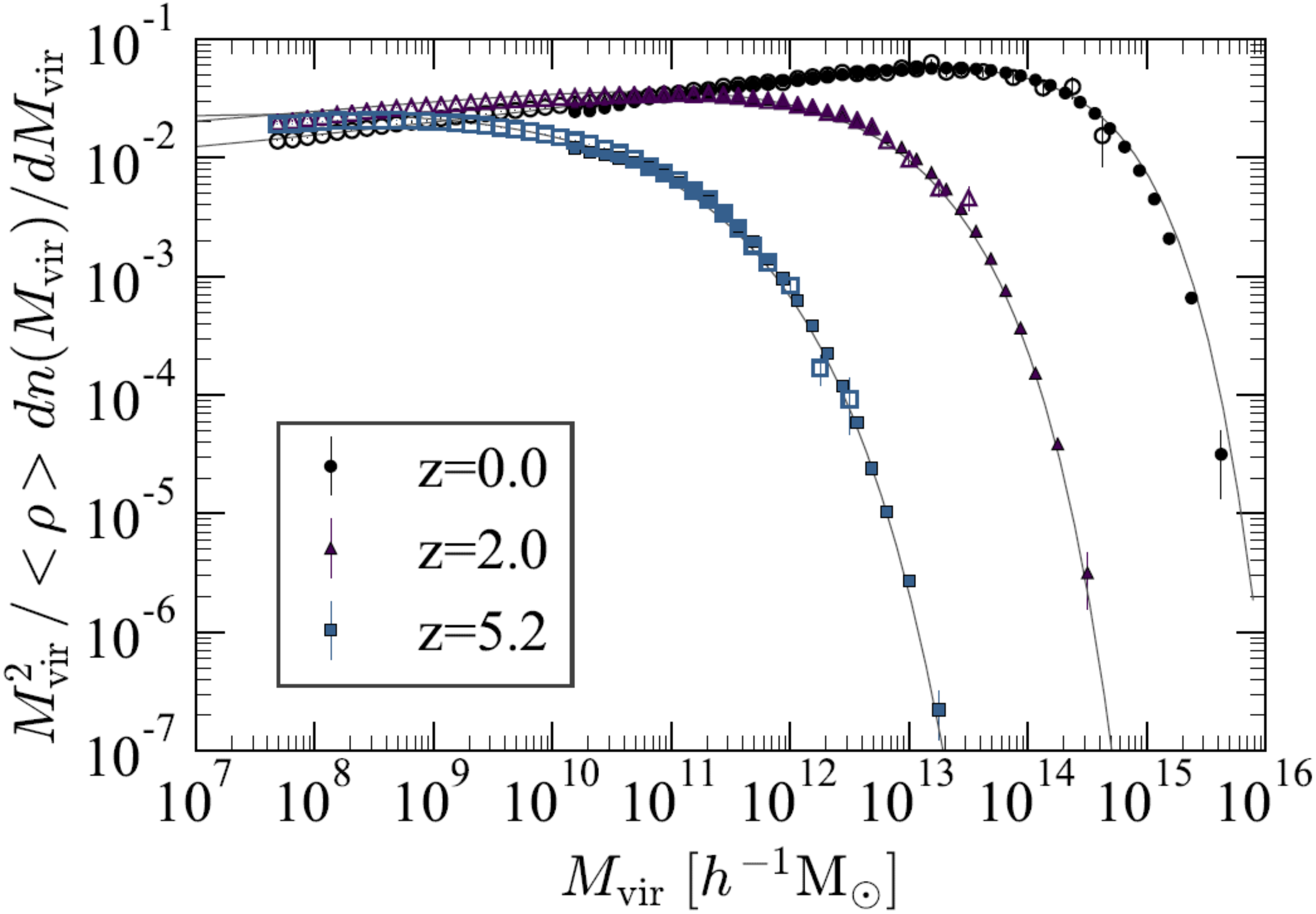
Name	#N	Box (Gpc/h)	particle mass (Msun/h)	cosmology	halo finder	merger tree	data public	code	reference
Uchuu	12800^3	2.0	3.27e8	Planck15	Rockstar	consistent trees	○	GreeM	Ishiyama+ 2021
Darksky	10240^3	8.0	3.9e10	WMAP9	Rockstar	no	△	2HOT	Skillman+ 2014
Euclid flagship	12600^3	3.78	2.4e9	Planck15	Rockstar ?	no	×	PKD GRAV3	Potter+ 2016
Outer Rim	10240^3	3.0	1.9e9	WMAP7	FoF	w/o Subhalo	△	HACC	Heitmann+2019

複数小～中規模シミュレーション

e.g., GLAM (Klypin+ 2018), Aemulus (DeRose+ 2019), Dark Quest (Nishimichi+ 2019), Quijote (Villaecusa-Navarro+ 2020), AbacusSummit (Maksimova+ 2021)

Ishiyama et al. 2021, MNRAS, 506, 4210

Application
ハロー質量関数

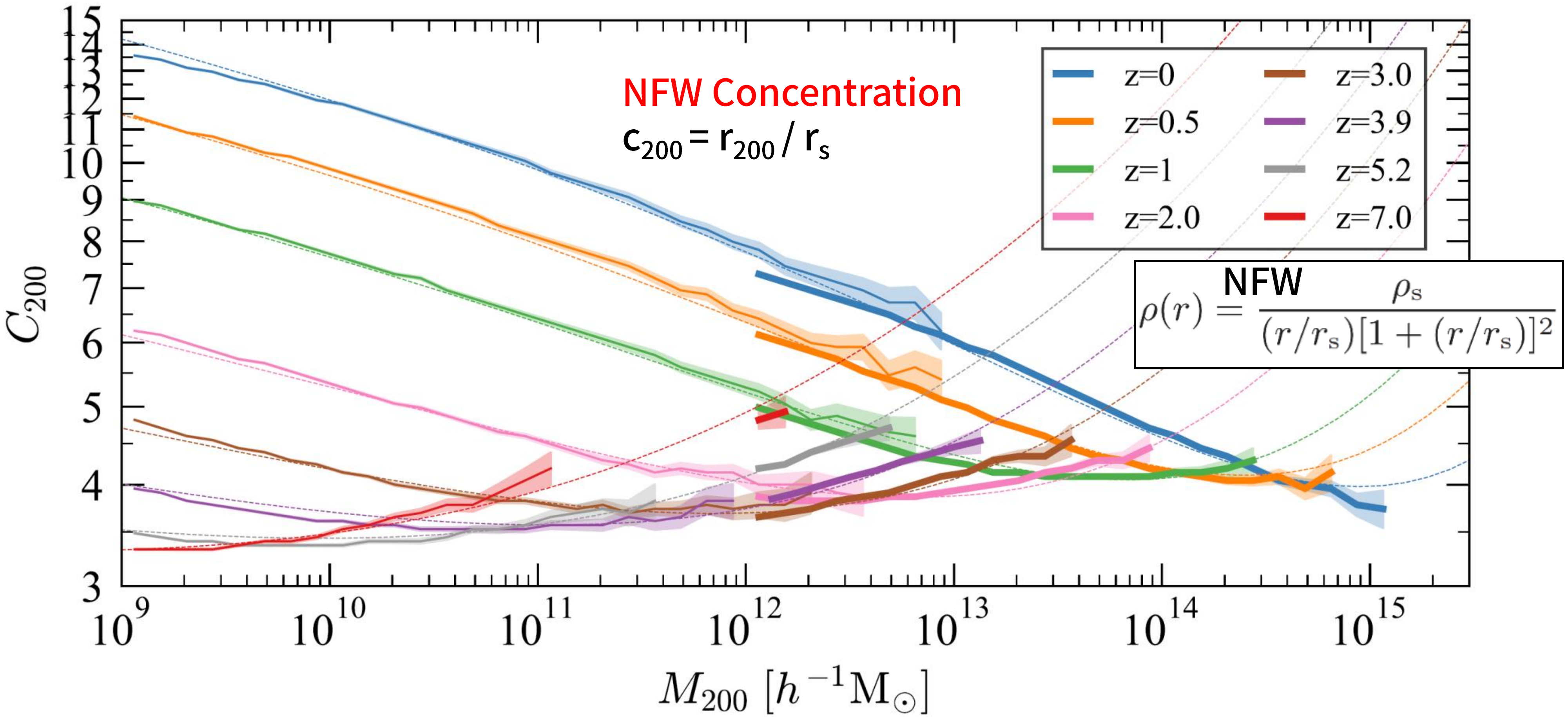


- 約8桁の質量にわたってハローを解像
- 数%レベルで2つのシミュレーションが収束

Application

Ishiyama et al. 2021, MNRAS, 506, 4210

mass-concentration relation

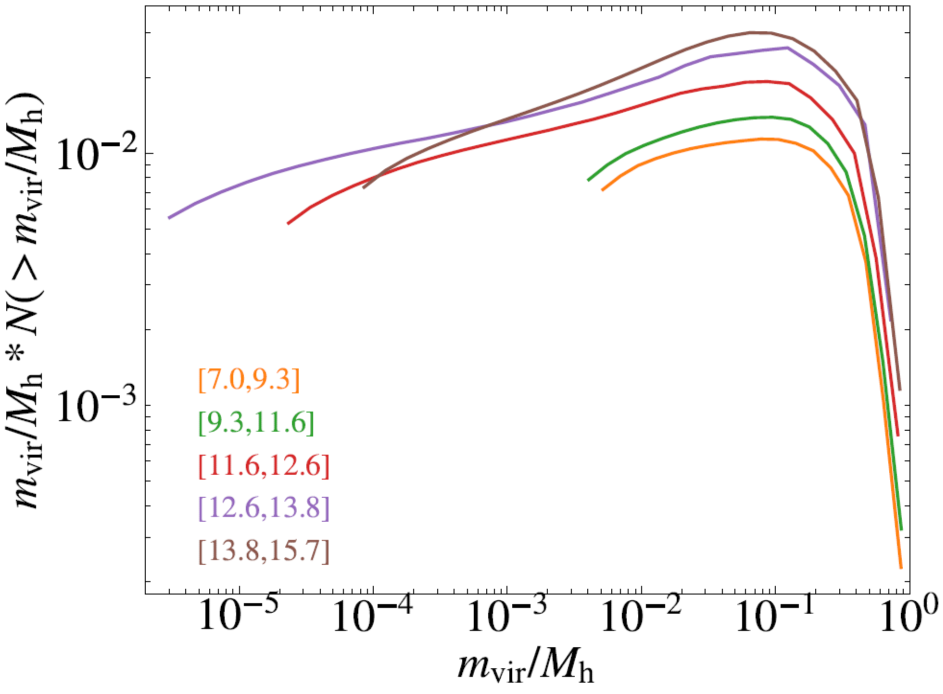


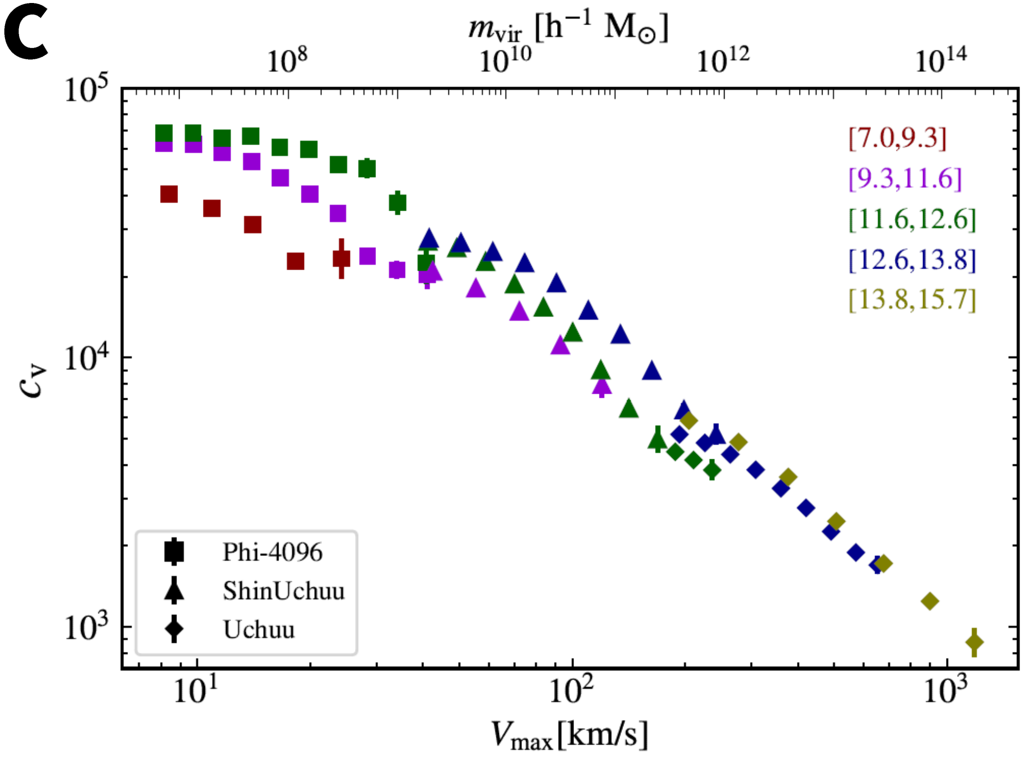
- ハローの質量集中度をよく再現する経験則モデルを構築。$10^{7\text{-}15}\ M_{sun}$ at $0<z<14$ の広範囲なハローに対し5%以内の精度を実現
- 伝統的な power law fitting は特に大質量側で精度がよくない

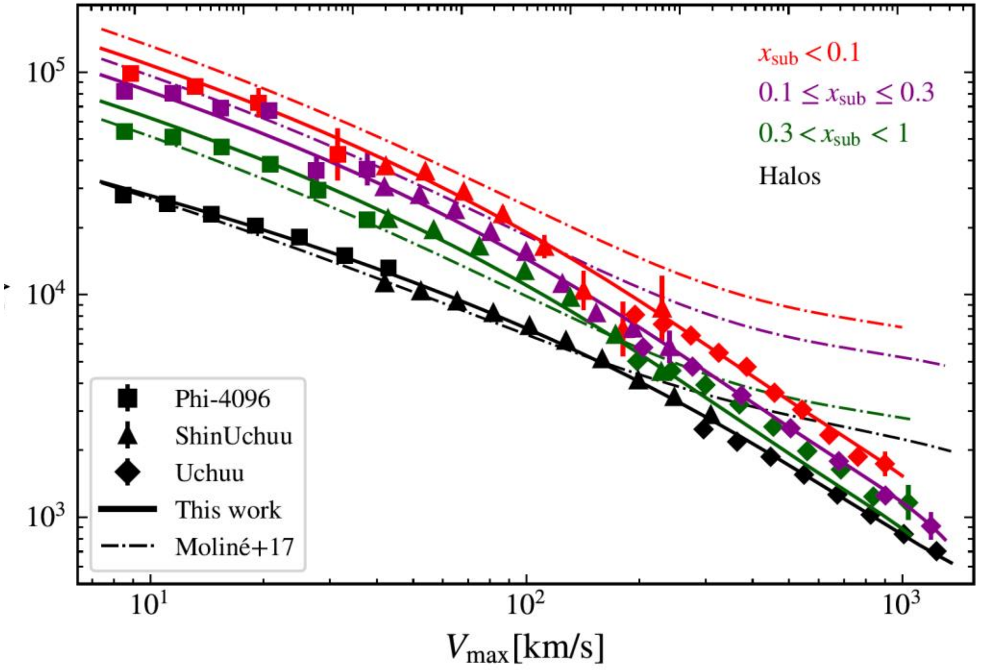
Application

Moline, Ishiyama et al., 2021, arXiv: 2110.02097

Subhalo demographic



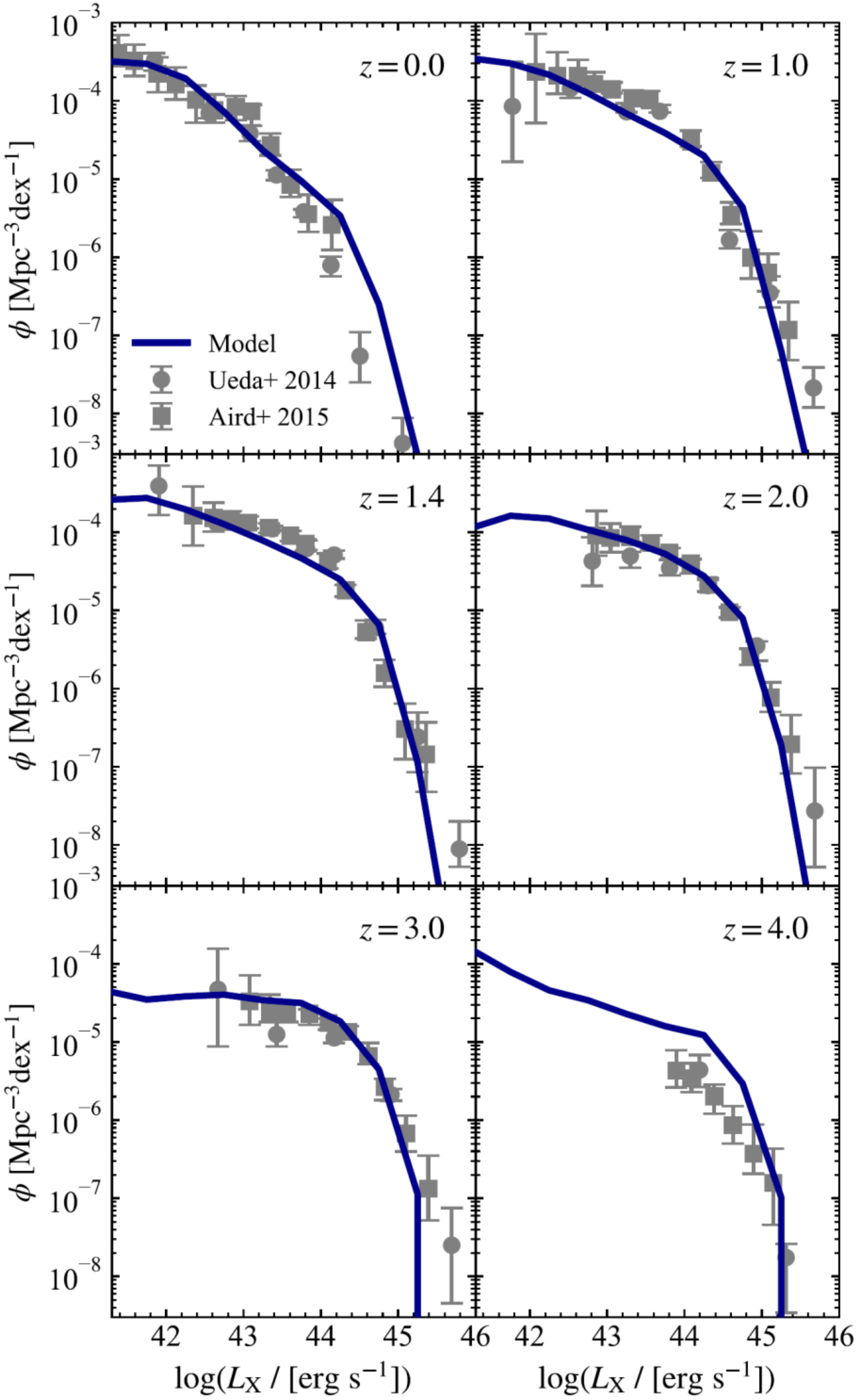




Name	N	L (h^{-1}Mpc)	m (h^{-1} $M_\odot$)	ε (h^{-1}kpc)
Uchuu	12800^3	2000	3.27×10^8	4.27
ShinUchuu	6400^3	140	8.97×10^5	0.40
Phi-4096	4096^3	16	5.13×10^3	0.06

Uchuu + ν^2GC (New Numerical Galaxy Catalog)

Oogi et al. in prep



- ハローの合体形成史に銀河形成を現象論的にモデル化
  - 銀河や活動銀河核形成に重要な物理過程は全てモデル化されている
  - MCMC parameter fitting
- 観測された銀河やAGNの光度関数 (z<6.0) を再現

Uchuu-ν^2GC galaxy/AGN catalogs are going to be publicly released soon.

Ishiyama et al. 2021, MNRAS, 506, 4210

Summary and future

- 次世代の大規模サーベイに向けた銀河と活動銀河核の模擬カタログを準備している
- DR1として, ハローとサブハローの数値カタログ、合体形成史、粒子データ、解析ツール (python) を公開した (~125TB)
  - http://skiesanduniverses.org/Simulations/Uchuu/
  - カタログにはあらかじめ計算したハロー進化の特徴量も含まれている (Vpeak, Vacc, and so on)
- DR2 (Uchuu+SAM) はもうすぐ。希望的観測では6月中