

計算科学の世界

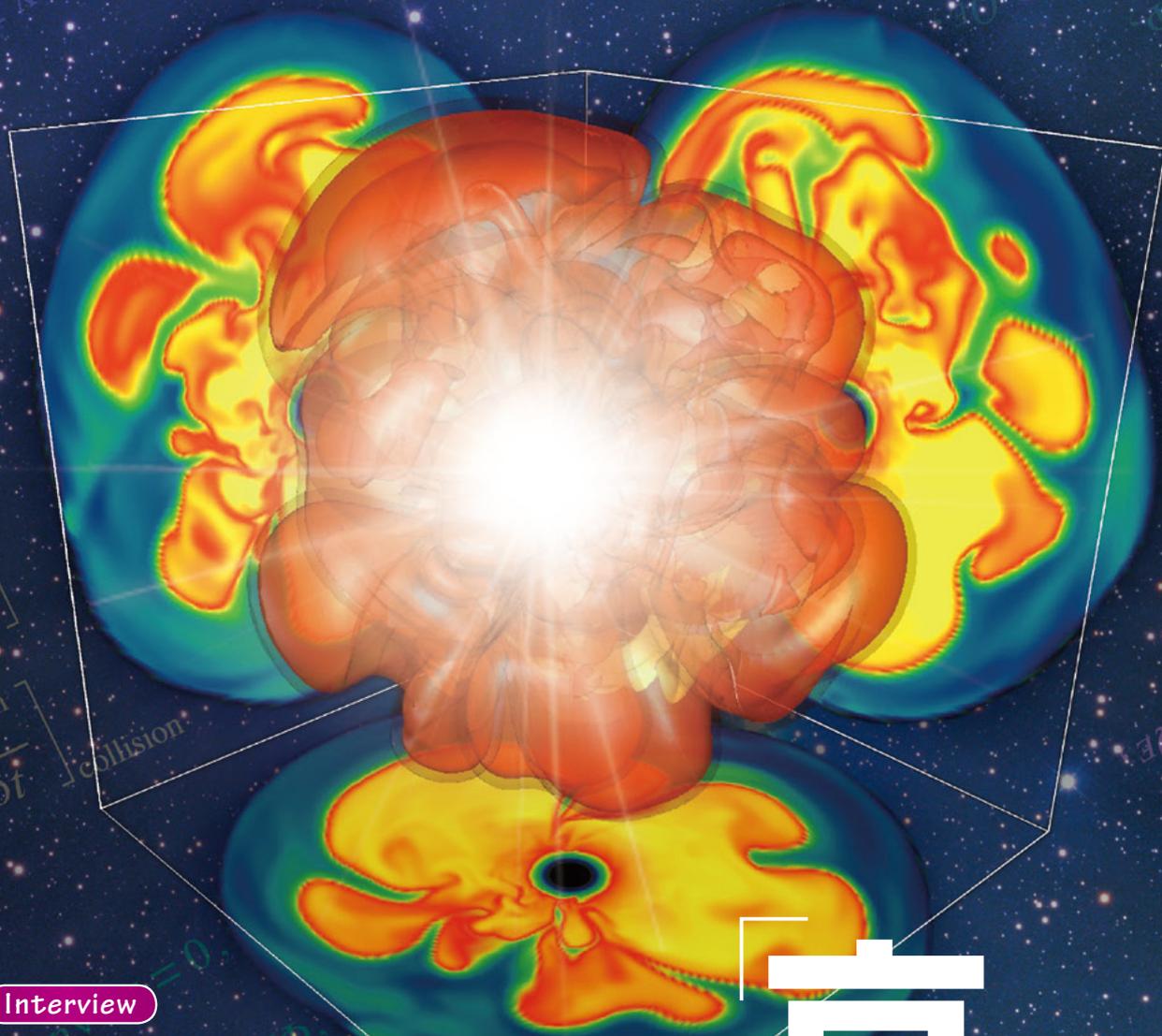
京がつくる時代

K computer Newsletter
October 2014

No. 9



K computer



Interview

超新星爆発を「京」で

再現 ニュートリノ加熱説の正しさが、より確実に



独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構

New 研究者に聞いてみよう!

牧野 淳一郎 チームリーダー

3次元シミュレーションを用いた超新星爆発のイメージ

超新星爆発を「京」で再現

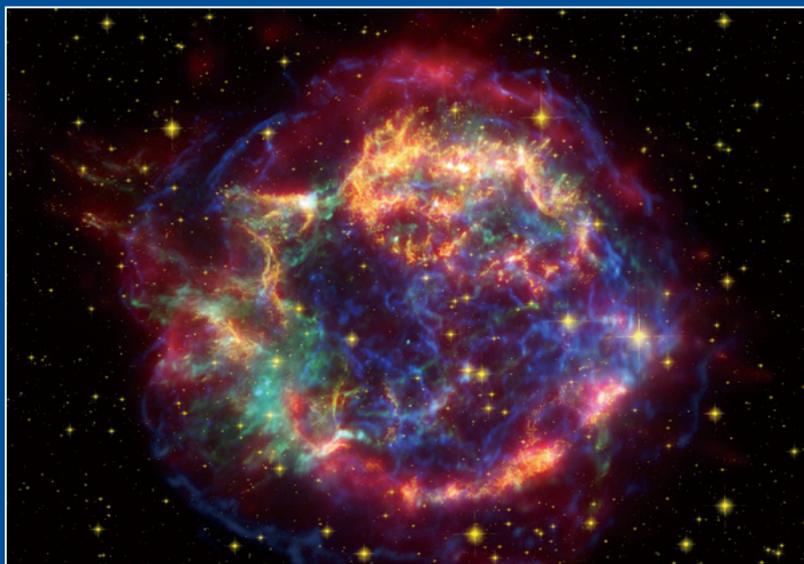
ニュートリノ加熱説の正しさが、より確実に

Interview

理化学研究所 長瀧天体ビッグバン研究室 研究員

滝脇 知也 Tomoya Takiwaki

星には、その一生を終えるときに大爆発するものがあります。この「超新星爆発」という現象は、古くから知られていますが、コンピュータの中で再現するのは、なかなか難しい仕事でした。しかし今回、滝脇さんを中心とするグループが「京」を使うことにより、3次元という自然に近い条件で爆発させることに成功しました。この成果は、超新星爆発のメカニズムの解明に貢献するもので、世界的に大きな注目を集めています。



カシオペア座A超新星残骸

超新星は物理学の進歩を促す実験場

夜空に突然現れ、ひときわ明るく輝く「超新星」。その名前とは裏腹に、星が一生の終わりに起こす大爆発です。

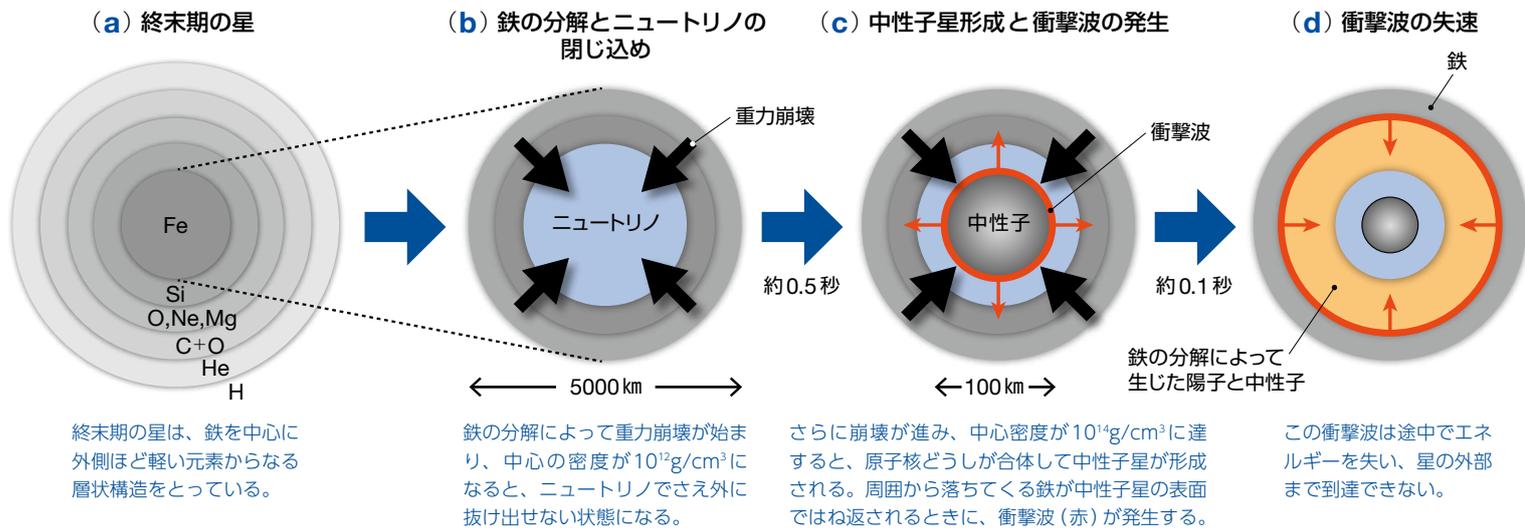
太陽の約8倍以上の質量の星がこの大爆発を起こすことはわかっていますが、どのようにして爆発が起こるのか、まだ詳しくはわかっていません。そのため、「**宇宙物理学における最重要未解決問題**」の1つといわれていま

Check it!

ニュートリノって何?

ニュートリノといえば、2002年に東京大学の小柴昌俊名誉教授がノーベル物理学賞を受賞したことを思い出す人もいるでしょう。その受賞理由は、大マゼラン雲で起きた超新星爆発で放出されたニュートリノを、1987年にカミオカンデという3000tの水をはった巨大なタンクで検出したことでした。

物質を分割すると、分子、原子、原子核と電子、…というようにどんどん小さくなっていき、クォークや電子などの素粒子にいきつきます。ニュートリノも素粒子の1つで、さまざまな反応で発生します。例えば、地球上には、太陽で核融合により発生したばく大な数のニュートリノが降り注いでいます。しかし、ニュートリノは電荷をもたず、とても小さいため、なんでも



終末期の星は、鉄を中心に外側ほど軽い元素からなる層状構造をとっている。

鉄の分解によって重力崩壊が始まり、中心の密度が 10^{12}g/cm^3 になると、ニュートリノでさえ外に抜け出せない状態になる。

さらに崩壊が進み、中心密度が 10^{14}g/cm^3 に達すると、原子核どうしが合体して中性子星が形成される。周囲から落ちてくる鉄が中性子星の表面ではね返されるときに、衝撃波(赤)が発生する。

この衝撃波は途中でエネルギーを失い、星の外部まで到達できない。

す。滝脇さんは「超新星爆発を説明できないのは、私たちの自然に対する理解がまだ不十分だからですよ」と話し、この問題の解決に取り組んでいます。

日本では1970年代に、滝脇さんの恩師である東京大学の佐藤勝彦名誉教授が、素粒子・原子核理論に基づいて超新星を理解しようと研究を始めました。以来、さまざまな爆発のメカニズムが議論されてきました。中でも有力とされているのが「ニュートリノ加熱説」です。2000年代に入り、計算能力の高いスーパーコンピュータが登場すると、この説に基づき爆発現象をシミュレーションしようという試みが世界中で始まりました。しかし、ことごとく失敗に終わりました。

それが、2005年頃になると、徐々に爆発するケースが出てきます。その

理由は、2次元でのシミュレーションが可能になったことでした。それまでは、コンピュータの計算能力の限界から計算は1次元で、星を完全な球だと見なしていたのですが、2次元の計算で超新星内部の物質や熱の流れ(対流)を表現できるようになったことで、爆発に至りました。実際の現象に、いかに計算を近づけていくかが、爆発再現の鍵だったのです。しかし、2次元の計算でも、星を回転楕円体だと仮定しており、実際とは異なっているため、3次元での計算が待たれていました。

星の内部で生まれる衝撃波が爆発を起こす

今回、滝脇さんらが3次元での再現に挑んだ「ニュートリノ加熱説」とは、どのような仮説なのでしょう(図1)。

若い星は水素やヘリウムといった軽い元素からできていますが、核融合反応が進むと重い元素が次第に増えていき、重くて安定な鉄ができるまで核融合は止まります。重い元素ができる際にエネルギーが放出されるので、星の内部は高温になります。星が終末期を迎えると、星の内部があまりにも高温であるために、今度は鉄がばらばらに壊れる反応が進み、急激に冷えます。さらに、ニュートリノが生まれる反応も起こり、中心からエネルギーを運びだします(「Check it!」参照)。その結果、星は自分の重力を支えることができな

くなり、つぶれ始めるのです。

この重力崩壊が進むと、星の中心部に、鉄由来の原子核どうしが合体した中性子星が形成されます。そして、周囲から落ちてくる鉄が中性子星の表面ではね返されるときに、衝撃波が発生します。この衝撃波が星の外部まで到達すれば、超新星は爆発するのです。

しかし、衝撃波は伝わるたびに、周囲の鉄の分解反応にエネルギーを奪われ、途中で止まってしまいます。その様子を滝脇さんは「熱湯(衝撃波の内側)に氷(鉄)を投げ込むようなものです」と表現します。このように弱くなった衝撃波が、ニュートリノによる再加熱で復活し、爆発に至ると考えるのが「ニュートリノ加熱説」です。

「京」の能力と3人の協力で3次元計算が実現

「3次元シミュレーションによる超新星爆発の再現は世界で初めてのことです。ニュートリノによる再加熱と対流によるかき混ぜ効果の両方を精密に扱うことによって成功しました。世界で最も現実の超新星爆発に近いのです」と滝脇さん。3次元での計算が可能になった背景には、「京」の計算能力の高さとともに、滝脇さんが仲間たちとともに優れた計算手法を開発したことがあります。

数値計算の中で特に難しかったのが、ニュートリノの動きと、どの程度

ニュートリノができる反応(冷却効果)



ニュートリノがなくなる反応(加熱効果)

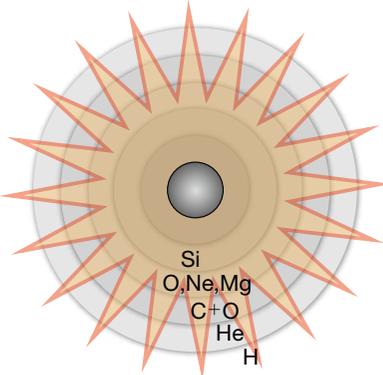
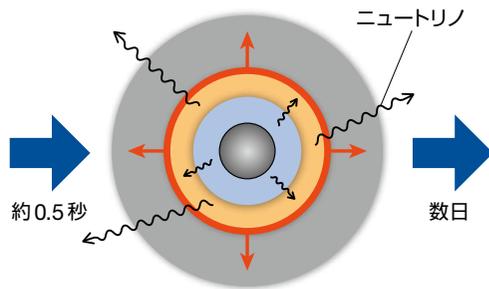


通り抜けてしまい、なかなか検出することができません。

星の重力崩壊のときには、電子と陽子から中性子とニュートリノができる反応がさかになり、ニュートリノが熱を持ち去って星の中心部を冷やします。しかし、中性子星ができると、その表面からニュートリノが放出され、その一部が中性子などと反応して熱が出ます。この熱で、衝撃波が再加熱されるのです。残りの大部分のニュートリノは宇宙に飛び散っていきます。

(e) 衝撃波の復活

(f) 超新星爆発



しかし、ニュートリノで加熱されて、衝撃波は復活する。

衝撃波が星の外部に達し、超新星は爆発する。

のニュートリノが衝撃波の再加熱に関与するか(ニュートリノ輻射輸送)を計算するところでした。2009年に、スイスのバーゼル大学のリーベンデルファー博士が、この計算のための近似法を開発していました。一方、対流の扱いについては、仲間の1人、福岡大学の固武慶さんが2次元で計算する手法を編み出していました。

もう1人の仲間、京都大学の諏訪雄大さんはこの2つの計算法を組み合わせ、少ない計算量でも、ニュートリノ再加熱をより正確に計算できる道を開いていました。そして、滝脇さんが2011年に、諏訪さんの計算法を3次元計算に適用したプログラムをつくりあげたのです。「元々はリーベンデルファー博士の近似法をそのまま使っていたのですが、僕のシミュレーションでは、この近似法の陰解法を陽解法(「スパコンのこぼ」参照)に変えたら、もっと簡単に計算できるのではないかと気づいて手を加えたんです」。こうして、ついに「京」での3次元シミュレーションが実現しました。滝脇さんが簡単にしたとはいえ、図1の(b)から(e)までのたった1秒間の現象を再現するために、「京」の計算ノードの5%を60日間も使う大計算でした。

した。図2は、シミュレーション結果を「エントロピー」という量で可視化したものです。エントロピーは、爆発的に膨張しているところで大きな値をとります。その時間変化を追うと、最初、ほぼ球形をしている衝撃波が、時間とともにいびつになって広がります。さらに、ニュートリノ加熱によって生じた対流の渦が分裂したり合体したりしながら、衝撃波の内部を大きく

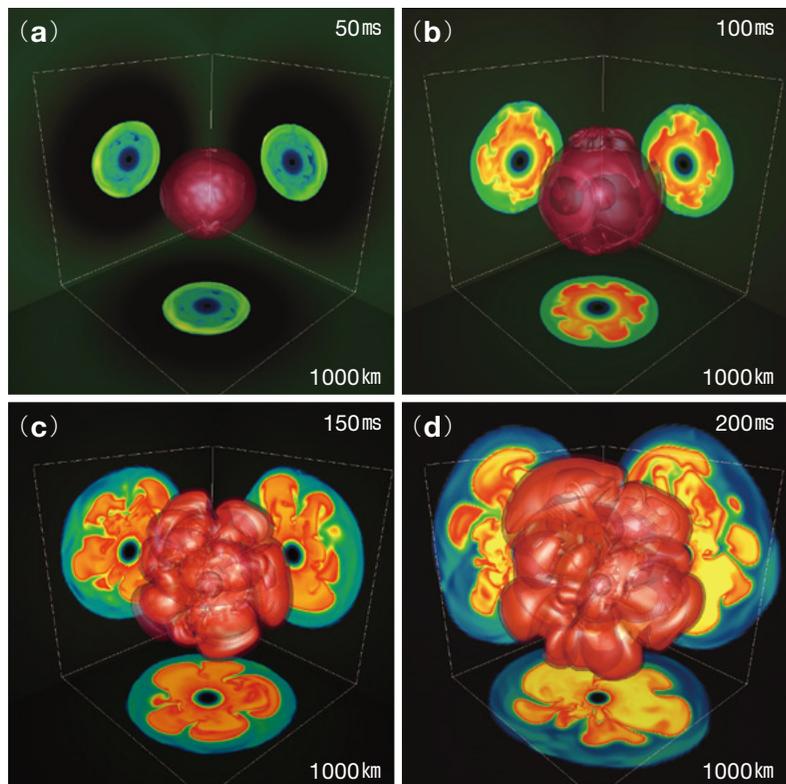
かきまぜているのがわかります。この対流によって加熱効率が上がるので、衝撃波は外部まで届くのです。

しかし、これで研究が終わったわけではありません。今回の計算で再現できた爆発のエネルギーは、実際の観測値の10分の1ほど小さいものでした。滝脇さんはその原因を、計算の一部に近似を使ったためだと考えており、より詳細に計算するためには、「京」より計算能力の高い次世代のスーパーコンピュータが必要だと考えています。

滝脇さんはすでに、このプログラムを使って、さまざまな大きさや質量をもつ星の一生を計算しており、その爆発の多様性に驚いています。「現実の世界では、巨大な星はブラックホールになるので、将来はそこまで再現できればと思っています」。すべての星の行く末を1つのプログラムで再現できるようになったとき、私たちの自然への理解は大きく前進することでしょう。滝脇さんたちのチャレンジはこれからも続きます。

図2 超新星爆発のシミュレーション結果

※動画はweb版で見られます



衝撃波が発生したときを0秒として、(a) 50ミリ秒後、(b) 100ミリ秒後、(c) 150ミリ秒後、(d) 200ミリ秒後のエントロピーを可視化したもの。温度が高く密度が低い部分(爆発的に膨張している部分)が赤と黄色で表示されている。(a)~(d)はいずれも中央に3次元のみた高温成分を、壁に3軸方向に切った断面図を示している。200ミリ秒の時点で中心から500kmの地点まで衝撃波が到達しており、これが超新星爆発の証拠となる。

すべての宇宙現象を説明できるプログラムを

04

今回の結果から、ニュートリノ加熱説が正しいことがかなり確実になりま

陰解法と陽解法

流 体の時間発展、つまり、「ものの流れが時間とともにどう変化するか」のシミュレーションは、宇宙の進化や気象予測など、さまざまな分野の解析に登場します。実際には、もの（ニュートリノのような粒子や、大気塊などの）位置の時間変化を表す微分方程式を立て、位置を示す座標 x が、ある時間 Δt 後にどれだけ変化するか（変化量 y ）を繰り返し計算して時間発展を調べます。この計算を行うには、「陰解法」と「陽解法」という方法があります。

陽解法は、現在の位置 x_i からの Δt 後の変化量 y_{i+1} を、 Δt 前から現在までの変化量 y_i をもとにして求める方法です。方程式は単純で、現在の情報があればすぐに計算できますが、 Δt を小さくとらないとうまく計算できないという弱点があります。

一方、陰解法は、 Δt 後の変化量 y_{i+1} をいったん予測し、それが最初の微分方程式を満たすかを確かめてから変化量

をきちんと求める方法です。先に行っては戻すことを繰り返すので、スパコンで解くべき方程式は複雑な行列式で表されることになり、それを解くには「行列式の反転」という計算量の大きな手続きが必要となります。しかし、予測を確かめながら進めるので、 Δt を大きくとつてもうまく計算することができます。

流体の時間発展の計算では、陰解法が使われるのが普通です。超新星爆発の際のニュートリノ輻射輸送のシミュレーションにも陰解法が使われてきましたが、今回、滝脇研究員は、「3次元計算では、そもそも Δt が小さいから、陽解法を使っても十分に計算できるのでは？」と気づき、実際に計算してみたところ、うまく計算することが

できました。陰解法での計算量は時間刻みの数 n の2乗から3乗に比例しますが、陽解法では n に比例するので計算量は激減し、さらに、エネルギー保存という条件も陰解法よりよく満たすといううれしい結果が得られました。

陰解法と陽解法の行列式

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

陰解法の行列式：対角以外の係数も入るので、複雑な連立方程式となり、反転しないと値を求められない。

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

陽解法の行列式：係数は対角のみなので、変数が1つの方程式がたくさんあるのと同じことになり、簡単に解くことができる。

「京を待ちわびて」

「京」は、たくさんのコンピュータ（計算ノード）を通信ケーブルでつないだ並列コンピュータです。ですから、プログラムを実行するときに、「京」全部を使うこともできれば、必要な分だけを区切って使うこともできます。

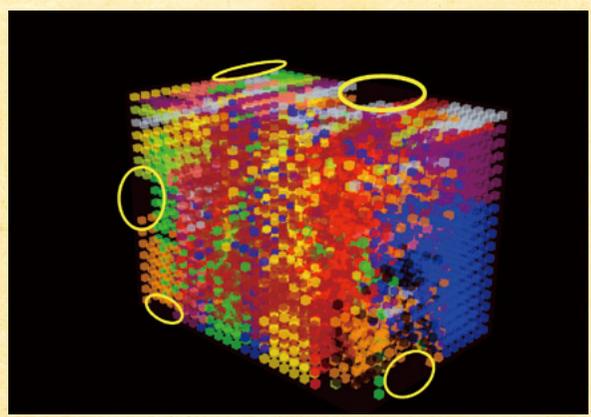
この特徴を生かして、ユーザーが「京」を平等、かつ、スムーズに利用できるようにし、稼働率を高くするために、私たちはさまざまな工夫をしています。ユーザーが「京」で実行したいプログラムは、それぞれ大きさ（必要な計算ノードの数と計算時間）が違います。そこで、「京」は「スケジューリング」という機能を使い、まるでパズルのように、各プログラムをなるべく隙間なく配置していきます。プログラムは基本的に先着順で実行されますが、後から送り込まれたプログラムでも、うまく隙間に入るようなら先に実行することもあります。

しかし、「京」のユーザーは多く、毎月数万本のプログラムが実行されるので、待ち時間が発生することもよくあります。また、どんなにうまくスケジューリングをしても、小さな隙間が必ず発生するため、その有効利用が運用上の課題となっていま

した。そこで、2013年7月から、「京を待ちわびて」という名前のソフトウェアが使われるようになりました。このソフトは、プログラムを実行する前に、その大きさを待ち時間を計算してくれ、また、すぐに使える計算ノードの数と計算時間も教えてくれます。

これにより、ユーザーは「プログラムを分割して実行させたほうが早く結果が出そうだ」とか、「待ち時間が長いので、隙間時間を利用して別の細かい作業（例えばデバッグ）をしよう」といった判断ができるようになりました。ユーザーが効率的に「京」を使えるようになっただけでなく、隙間時間も効果的に活用してもらえるようになったのです。「京を待ちわびて」は、実は「待ちわびる」時間を短くしてくれるソフトなんですね。

京では、3次元で配置されている計算ノードに、100本以上のプログラムがパズルのように詰め込まれている。しかし、どうしても小さな隙間が空いてしまう（黄色の楕円で囲んだ部分）。こうした隙間の有効活用が可能になった。



牧 野さんは岐阜県出身の天体物理学者です。東京大学の学生時代に、重力計算に特化したGRAPEシリーズ計算機の開発に携わり、以来、おもに理論やシミュレーションによる天体の形成・進化の研究や、計算アルゴリズムの研究に取り組んできました。牧野さんは、その功績によってスパコン界でも権威ある賞の1つ「ゴードン・ベル賞」を7回も受賞しています。AICSでは、1個ずつの粒子に数値をおいてシミュレーションを行う「粒子法」という計算手法を「京」で実現し、汎用性に富んだソフトウェアの開発に取り組んでいます。そんな牧野さんにお話を聞きました。（兵庫県立宝塚北高等学校化学部一同）

*** プロフィール ***
 東京大学大学院総合文化研究科博士課程修了。東京大学教養学部助手、助教、東京大学大学院理学系研究科助教、国立天文台教授、東京工業大学理学研究流動機構教授を経て現職に。エクサスケール・スーパーコンピュータ開発プロジェクトにも参加している。



粒子系シミュレータ研究チーム **牧野 淳一郎** チームリーダー

兵庫県立宝塚北高等学校化学部の皆さん



研究者に聞いてみよう!

第1回



Q 1日の睡眠時間は、どのくらい確保できますか?

A 私はちゃんと寝ない仕事ができないので、少なくとも6時間は寝て、週末はもうちょっと寝て足りない分を補っています。

Q なぜ、天体物理学を研究しようと思ったのですか?

A 大学4年生のときに、新しい視点や、ほかの人がやっていないこと、できなかったことを大事に研究している指導者に出会い、大学院でその方といっしょに研究したことがとても楽しかったからです。いま思えば、天体物理学というよりは、その方と研究したいという気持ちが大きかったです。私と同じような動機で研究者になった人は、案外多いかもしれません。

Q 昔から科学に興味がありましたか?

A 父親がエンジニアだったので、その影響なのか、遺伝的なものなのかわかりませんが、小さいころから工作が好きで、中学生のときには、理論的な計算をして自分で設計した模型飛行機を飛ばしていました。

Q 子供のころの夢は、何でしたか?

A 大学に入ってからしばらくまでは、父親のように、何か物をつくるエンジニアになろうとしていました。

Q 高校のころに一番好きだった教科は何ですか?

A 数学です。自分なりに筋道を立てて考えてよいところがおもしろかったのです。

Q 今の1日の生活リズムは、どのようなものですか?

A だいたい10時にここ(AICS)に来て研究の仕事をして、6~7時には家に帰って少し仕事の続きをして...という感じですね。

Q 研究以外に、趣味はありますか?

A 最近はいろいろな本を読むことです。科学的なものとか哲学というよりは、もっと気軽な小説を読むことが多いです。

Q 研究をしていて、壁にぶつかったりすることはあるのですか?

A 計算機をつくったのに動かないなど、行き詰まることは割とよくあります。その場合は、何とか解決できるように努力しています。壁を乗り越えてうまくいったときは、達成感があります。

Q モットーは何ですか?

A モットーはむしろもたないようにしています。新しい現象に遭遇したときには、新しい考え方をしなければなりません。1つのものに固執して、今までの常識にとらわれてしまうと、逆に新しいものを見逃してしまいます。そのため、目の前のことに柔軟に対応できるように心掛けています。

Q 研究を進めるうえでの目標は何ですか?

A これまでの計算機の性能を大幅に上回る後継機をつくり、さまざまな科学研究に貢献することです。



インタビューを終えて

一流の研究者に直接お話をうかがうことは、ふだんはできない経験です。研究の内容だけでなく、日常生活にも興味があったので、お話を聞けてとてもうれしく思いました。牧野さんは研究に取り組むだけでなく、科学者の立場から原発事故に迫った『原発事故と科学的方法』も執筆されています。この本についてもうかがい、人の暮らしを豊かにするのも、また安全を脅かすのも科学なのだということを実感しました。我々化学部には、研究者をめざす者も多いので、このことは肝に命じておかなければならないと強く思いました。お忙しい中、私たちのために時間をとっていただき、ありがとうございます。（菅 優伍、木村 航、藤原 朋子、峯田 初音）



〜なるほど!

計算科学の世界

京がつくる時代

No. 9
October 2014

発行日 平成26年10月17日
 編集発行 独立行政法人理化学研究所 計算科学研究機構 広報国際室
 〒650-0047 兵庫県神戸市中央区港島南町7-1-26
 TEL: 078-940-5555 (大代表) FAX: 078-304-4964
 E-mail: aics-koho@riken.jp



「京」のもっと詳しい情報はこちら ▶ <http://www.aics.riken.jp>
 ホームページ版「計算科学の世界」はこちら ▶ <http://www.aics.riken.jp/newsletter/>