

平成 30 年度 文部科学省

ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関する
アプリケーション開発・研究開発（萌芽的課題）

平成 30 年度

「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の
解明（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）」

成果報告書

令和元年 5 月 31 日

国立大学法人神戸大学

理学研究科 教授 牧野 淳一郎

本報告書は、文部科学省の科学技術試験研究委託事業による委託業務として、国立大学法人神戸大学が実施した平成30年度「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）」の成果を取りまとめたものです。

目次

1. 委託業務の題目	1
2. 実施機関（代表機関）	1
3. 委託業務の目的	1
4. 平成 30 年度（報告年度）の実施内容	1
4-1. 実施計画	1
4-2. 実施内容（成果）	5
4-2-1. サブ課題 A 「惑星の起源の解明」	6
4-2-2. サブ課題 B 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」	13
4-2-3. サブ課題 C 「太陽活動による地球環境変動の解明」	21
4-2-4. サブ課題 D 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」	27
4-3. 活動（研究会等）	35
4-4. 実施体制	35
別添 1 学会等発表実績	
別添 2 実施計画	

1. 委託業務の題目

[太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）]

2. 実施機関（代表機関）

代表 機 関	機関名		国立大学法人神戸大学			
	所在地		〒657-8501 兵庫県神戸市灘区六甲台町1番1号			
	課題 責任者	ふりがな	まきの じゅんいちろう	生年	西暦 1963年1月6日（56歳）	
		氏名	牧野 淳一郎	月日	※2019年4月1日現在	
		所属部署名	理学研究科		役職	教授
		連絡先	Tel. 078-599-6730		Fax. 078-599-6735	
			E-mail jmakino@people.kobe-u.ac.jp			
	事務 連絡 担当者	ふりがな	うすい ふみひこ			
		氏名	臼井 文彦			
		所属部署名	惑星科学研究センター	役職	特命助教	
連絡先		Tel. 078-599-6730		Fax. 078-599-6735		
		E-mail usui@cps-jp.org				

3. 委託業務の目的

地球がどのように生まれ、どのようにして生命を育む惑星に進化したか、さらには現在及び将来の地球・太陽・太陽系の進化が人類社会にどのような影響を及ぼしうるかを解明するため、惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野のシミュレーション研究者が結集し、太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。このため、国立大学法人神戸大学を中核機関として、分担機関である国立大学法人東京工業大学、国立大学法人大阪大学、国立研究開発法人理化学研究所、国立大学法人東京大学、国立大学法人京都大学、国立大学法人名古屋大学、国立大学法人千葉大学、国立大学法人筑波大学と連携し、研究開発を推進する。

4. 平成30年度（報告年度）の実施内容

4-1. 実施計画

①サブ課題A「惑星の起源の解明」

平成30年度は、本格実施フェーズ初年度として、以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、「京」および既存の計算資源を用いて、分担機関の国立大学法人東京工業大学、国立大学法人大阪大学、国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センターと共同で実施する。また、ポスト「京」の利活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

並列計算コード開発を進め、惑星集積シミュレーション、星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーションを行うことを目標として以下を実施する。

- ・ 「京」での惑星集積シミュレーションの成果を踏まえて、ポスト「京」で目指す惑星集積過程における具体的科学目標を設定した上で、これまでに開発した最適化されたコードにより、本格的な大域的重力N体シミュレーションおよび非理想磁気流体シミュレーションを実行する。
- ・ 磁気流体シミュレーションコードAthena++を用いて、現実的な温度・電離度・抵抗率分布を考慮した原始惑星系円盤の高解像度大域的な非理想磁気流体シミュレーションを本格的に実行し、円盤内の乱流の分布と性質を明らかにする。
- ・ FDPSを用いて開発したP³T法の大域的N体シミュレーションコードの最適化、追加機能の実装を進める。

②サブ課題B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

平成30年度は、本格実施フェーズ初年度として、以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、「京」および既存の計算資源を用いて、分担機関の国立大学法人東京大学、国立大学法人京都大学と共同で実施する。また、ポスト「京」の利活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

岩石惑星・衛星の火成活動・マンテル対流、ガス惑星表層と深部の循環、火星全球ダストストームを対象とした球面・球殻形状での高解像度数値計算を行うことを目標として以下を実施する。

- ・ 三つのテーマ「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」「岩石惑星の火成活動～マンテル対流系の三次元球殻モデリング」「ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで」間のより一層の情報共有を図り、それぞれのモデル（岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデル）で必要となる基礎ルーチンの開発及び最適化を進め、「京」上での大規模計算の実装実験を実施する。特に「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」に関しては、火星大気放射モジュールを導入した火星大気計算を「京」上で実施する。
- ・ 3次元矩形領域における火成活動・マンテル対流結合系のモデルを現実の月のマンテルの幾何形状に合わせて3次元球殻の一部におけるモデルに拡張する。地球などで見られるパルス的な火山活動のシミュレーションを開始し数値コードの有効性を確認する。プレートテクトニクスの3次元モデルも用いたシミュレーションを推し進める。
- ・ ガス惑星大気の流れと相互作用する渦をシミュレートするための高精度高解像度計算を行なう回転球殻対流スペクトルモデルにスペクトル変換ライブラリを導入し、メニーコアマシンでの計算チェックおよび計算速度の追求を行う。

③サブ課題C「太陽活動による地球環境変動の解明」

平成30年度は、本格実施フェーズ初年度として、以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケーション開発・研究開発について、「京」および既存の計算資源を用いて、分担機関の国立大学法人名古屋大学、国立大学法人千葉大学と共同で実施する。また、ポスト「京」の利活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

太陽フレアとその地球環境影響のシミュレーションの開発、太陽対流層の超大規模・長時間シミュレーションを行うことを目標として以下を実施する。

- ・ 太陽活動領域と太陽コロナを結合したモデルを開発し、太陽フレアの発生からコロナ質量放出形成までの初期実験を行なう。超高精度磁気圏モデル及び衛星環境モデルの初期実験計算を行う。
- ・ 「京」及び名古屋大学「FX100」を使って、太陽対流層から光球までを包括した熱対流計算を実施するとともに、太陽対流層のみを対象とし、全球を包括した高解像度の計算も並行して実施する。

④サブ課題D「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

平成30年度は、本格実施フェーズ初年度として、以下に示す本萌芽的課題に関するアプリケー

ション開発・研究開発について、「京」および既存の計算資源を用いて、分担機関の国立大学法人筑波大学、国立大学法人岡山大学と共同で実施する。また、ポスト「京」の利活用による成果創出に向けた知見の獲得や計算手法の確立を図る。

星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算を行うことを目標として以下を実施する。

- ・ 「京」、COMA、Oakforest-PACSを用いて、ダスト上の有機分子合成過程の大規模な第一原理分子動力学計算を実施する。特に、星間グラファイト、酸化グラファイトおよびPAH上での有機分子合成過程の計算を、CPMD法を用いて実施する。
- ・ 原始太陽系におけるダスト成長過程の解明に向け、「京」、名古屋大学「FX100」、Oakforest-PACS等を活用し、ポスト「京」用の原始惑星系円盤中のダスト粒子の衝突付着成長シミュレーションコードの開発を進める。粒子から流れへのback reactionの導入を行うとともに、コードのさらなる高速化を試みる。

また、分担機関と連携し、再委託によって、以下の⑤～⑬の研究開発に取り組む。

⑤サブ課題A全体の統括および惑星集積シミュレーション

(再委託先：国立大学法人東京工業大学)

「京」での惑星集積シミュレーションの成果を踏まえて、ポスト「京」で目指す惑星集積過程における具体的科学目標を設定した上で、これまでに開発した最適化されたコードにより、本格的な大域的重力N体シミュレーションおよび非理想磁気流体シミュレーションを実行する。

⑥星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーション

(再委託先：国立大学法人大阪大学)

前年度に引き続き、開発した公開磁気流体シミュレーションコードAthena++を用いて、現実的な温度・電離度・抵抗率分布を考慮した原始惑星系円盤の高解像度大域的な非理想磁気流体シミュレーションを実行し、円盤内の乱流の分布と性質を明らかにする。当初は非理想磁気流体効果としてまずオーム散逸と両極性拡散を考慮するが、並行してホール効果の導入も進める。

⑦並列計算コード開発、サブ課題間連携推進

(再委託先：国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究センター)

FDPS (Framework for Developing Particle Simulator)を用いて開発したP³T法 (Particle-particle Particle-tree)の大域的N体シミュレーションコードの最適化、追加機能の実装を国立大学法人東京工業大学と協力して進める。

⑧サブ課題B全体および「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」の統括推進

当該サブ課題を構成する三つの球対流研究テーマ「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」「岩石惑星の火成活動～マントル対流系の三次元球殻モデリング」「ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで」間のより一層の情報共有を図り、それぞれのモデル(岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデル)で必要となる基礎ルーチンの開発及び最適化を進め、「京」上での大規模計算の実装実験を実施する。特に「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」に関しては、昨年度までに開発実装した火星大気放射モジュールを導入した火星大気計算を「京」上で実施し、その数値解を吟味するとともに「京」上での計算効率を追求する。

⑨岩石惑星の火成活動～マントル対流系の三次元球殻モデリング統括推進

(再委託先：国立大学法人東京大学)

平成29年度に開発した3次元矩形領域における火成活動・マントル対流結合系のモデルを現実の月のマントルの幾何形状に合わせて3次元球殻の一部におけるモデルに拡張する。さらにこのモデルを用いて、地球などで見られるパルス的な火山活動のシミュレーションを開始し数値コードの有効性を確認する。これと同時に、平成29年度に開発したプレートテクトニク

スの3次元モデルも用いたシミュレーションを推し進める。

⑩ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流までの統括推進

(再委託先：国立大学法人京都大学)

ガス惑星大気の流れと相互作用する渦をシミュレートするための高精度高解像度計算を行なう回転球殻対流スペクトルモデルに昨年度までに開発したスペクトル変換ライブラリを導入し、メニーコアマシンでの計算チェックおよび計算速度の追求を行う。

⑪サブ課題C全体の統括および太陽フレアとその地球環境影響のシミュレーションの開発

(再委託先：国立大学法人名古屋大学)

太陽活動領域と太陽コロナを結合したモデルを開発し、太陽フレアの発生からコロナ質量放出形成までの初期実験を行なう。超高精度磁気圏モデル及び衛星環境モデルの初期実験計算を行う。

⑫太陽対流層の超大規模・長時間シミュレーション

(再委託先：国立大学法人千葉大学)

「京」及び名古屋大学「FX100」を使って、太陽対流層から光球までを包括した熱対流計算を実施するとともに、太陽対流層のみを対象とし、全球を包括した高解像度の計算も並行して実施する。

⑬サブ課題D全体の統括および星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算の実施

(再委託先：国立大学法人筑波大学)

「京」、COMA、Oakforest-PACSを用いて、ダスト上の有機分子合成過程の大規模な第一原理分子動力学計算を実施する。特に、星間グラファイト、酸化グラファイトおよびPAH (Polycyclic Aromatic Hydrocarbon) 上での有機分子合成過程の計算を、CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) 法を用いて実施する。

⑭原始太陽系におけるダスト成長過程の研究

(再委託先：国立大学法人岡山大学)

原始太陽系におけるダスト成長過程の解明に向け、「京」、名古屋大学「FX100」、Oakforest-PACS等を活用し、ポスト「京」用の原始惑星系円盤中のダスト粒子の衝突付着成長シミュレーションコードの開発を進める。粒子から流れへのback reactionの導入を行うとともに、他のサブ課題とも連携し、コードのさらなる高速化を試みる。

⑮プロジェクトの総合的推進

プロジェクト全体の連携を密としつつ円滑に運営していくため、運営委員会や研究連絡会の開催等、参画各機関の連携・調整にあたる。特に、プロジェクト全体の進捗状況を確認しつつ計画の合理化を検討し、必要に応じて調査あるいは外部有識者を招聘して意見を聞くなど、プロジェクトの推進に資する。プロジェクトで得られた成果については積極的に公表し、今後の展開に資する。

4-2. 実施内容（成果）

本課題では惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目的として、ポスト「京」を想定した計算コード・基礎ルーチンの開発および科学目標の詳細化・大規模計算の実施を進めている。本提案はサブ課題 A-D からなり、サイエンスと問題解決の手法の両面で相互に協力しながら研究を推進している。

平成 30 年度において、サブ課題 A「惑星の起源の解明」では、並列計算コード開発を進め、惑星集積および星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーションの本格実施および追加機能の実装を進めた。サブ課題 B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」では、岩石惑星モデル・惑星大気モデル・ガス惑星モデルという 3 つの球対流の高解像度数値計算を行うことを目標として、研究テーマ間での計算技術に関する情報共有を図りつつ、それぞれのモデル開発を進め、「京」上での大規模計算の実装実験を実施した。サブ課題 C「太陽活動による地球環境変動の解明」では、太陽の表面から対流層の底までの一貫した計算による黒点の拡散・形成の再現、多層格子電磁流体力学コードを用いた太陽面爆発現象の再現、および地球磁気圏と衛星環境を再現する MHD シミュレーションとプラズマ粒子シミュレーションの連成計算フレームワークの開発を進めた。サブ課題 D「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」では、星間有機分子の生成及び分解機構を解明するために第一原理分子動力学計算を実施し、原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにするためにダストの衝突付着成長シミュレーションコードの開発を行った。

サブ課題間の連携のために、本課題では本格実施フェーズ推進検討会議(平成 30 年 7 月)、重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」サブ課題 C「大規模数値計算と広域宇宙観測データの融合による宇宙進化の解明」との共催での第 2 回・天体形成シミュレーション研究会(平成 30 年 10 月)、公開シンポジウム(平成 31 年 3 月・東京工業大学)などを開催し、達成すべきサイエンスの内容や技術的課題を共有・議論した。研究推進の体制構築や進捗状況確認のために、構成員 16 名からなる課題運営委員会を定期的に開催している。技術的課題に関しては理研 R-CCS 他と連携・意見交換をしながら、ポスト「京」向けのアプリケーションの開発・最適化を進めている。

本プロジェクトで得られた成果について、サブ課題 B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」では、静力学全球金星大気モデル(AFES-Venus)を用いた高解像度シミュレーションによって、金星探査機「あかつき」が初めて捉えた「惑星規模筋状構造」の再現に成功し(Kashimura et al. 2019, Nature Communications)、神戸大学・JAXA・京都産業大学・慶應大学・JAMSTEC 共同で国内外にプレスリリースを行い、大手新聞社各紙に掲載された(平成 31 年 1 月)。

4-2-1. サブ課題A「惑星の起源の解明」

平成30年度において、サブ課題Aでは並列計算コード開発を進め、惑星集積および星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーションの本格実施および追加機能の実装を進めた(4-1. 実施計画①⑤⑥⑦に対応)。

(1) 大域的惑星集積シミュレーション

東京工業大学では、粒子数が1億体オーダーの微惑星集積シミュレーションを目指したコード開発を理研R-CCSと共同で行い、実装した。原始惑星系円盤ガスの惑星コアへの降着を考慮したガス惑星形成、惑星と円盤との重力相互作用によって引き起こされるタイプ1惑星軌道移動の効果も実装に移している段階である。ガス降着した巨大惑星の重力は円盤の広い領域に影響を及ぼし、また、惑星のタイプ1移動は速いので惑星軌道の動径方向の移動は広いため、動径方向の領域を広くとったグローバルな計算が必要となってくる。初期条件として、分解能を担保する比較的小さい微惑星天体群が1 au以内から40 auまでの広がっている分布を仮定すると、1億体ほど必要となる。新しく開発したGPLUM (Ishigaki, Kominami, Makino & Fujimoto, in prep)はこのシミュレーションを可能にする。このコードは4次エルミート法とツリー法を組み合わせ、微惑星の質量により、ツリー法を適用する範囲を決めることで高速化をはかった (Ishigaki et al. in prep, 図1)。テスト計算として、10万體で2万年の計算を実行したところ、十分精度よく計算できた (Ishigaki et al. in prep, 図2、3)。これからプロダクトランを走らせる予定である。

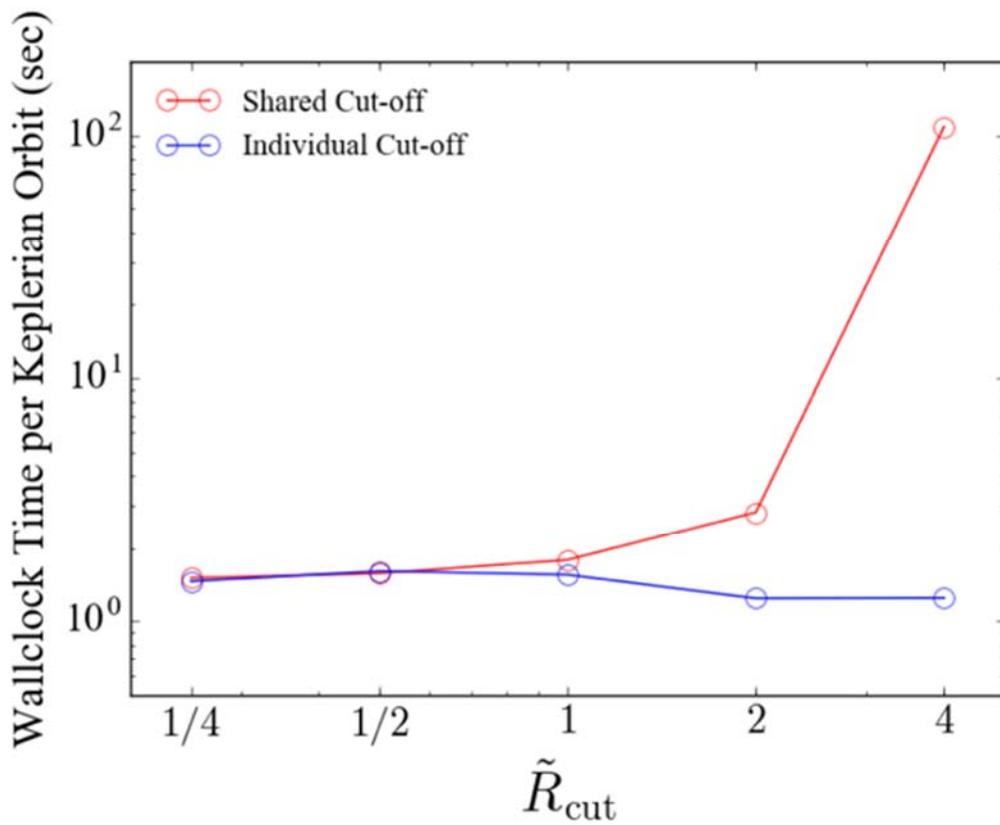


図 1 : 新しく開発した GPLUM によるシミュレーションにおいて、独立カットオフ半径を採用した時(青線)の方が、共有カットオフ半径を採用する時(赤線)より計算時間が短縮される。横軸がカットオフ半径で縦軸が 1 ケプラー計算するのにかった実時間。

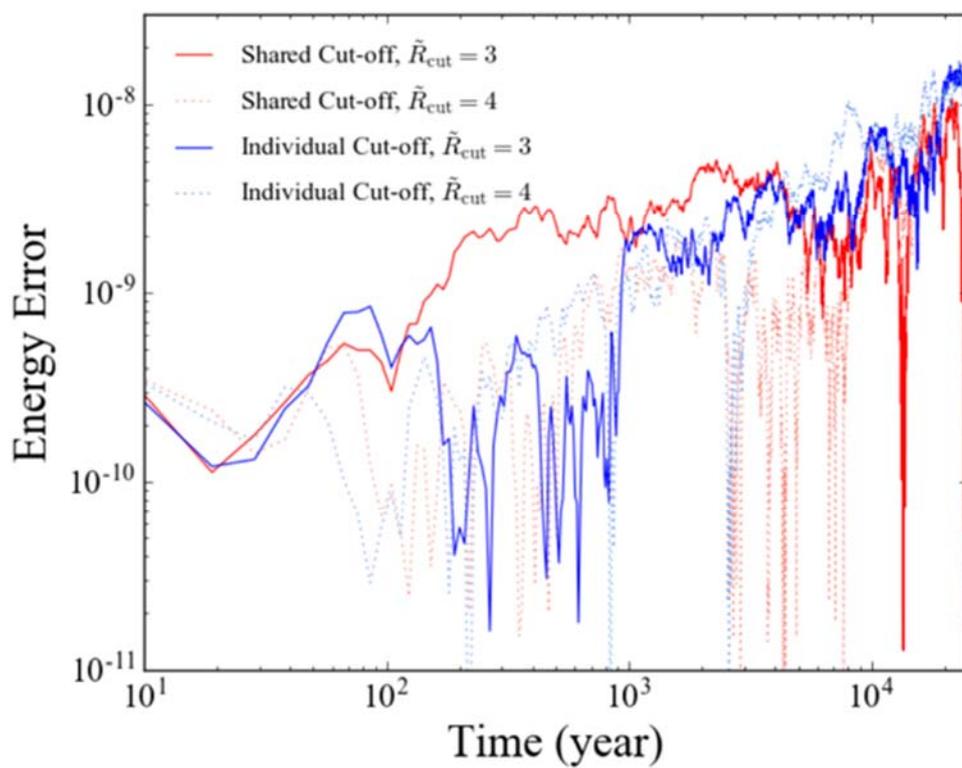


図 2 : 新しく開発した GPLUM によるシミュレーションにおいて、長時間計算でも計算精度が保たれている。横軸が積分時間で縦軸が相対誤差。

初期微惑星質量(解像度) $m_{\text{init}} = 10^{22}$ g のときの軌道長半径-離心率の変化

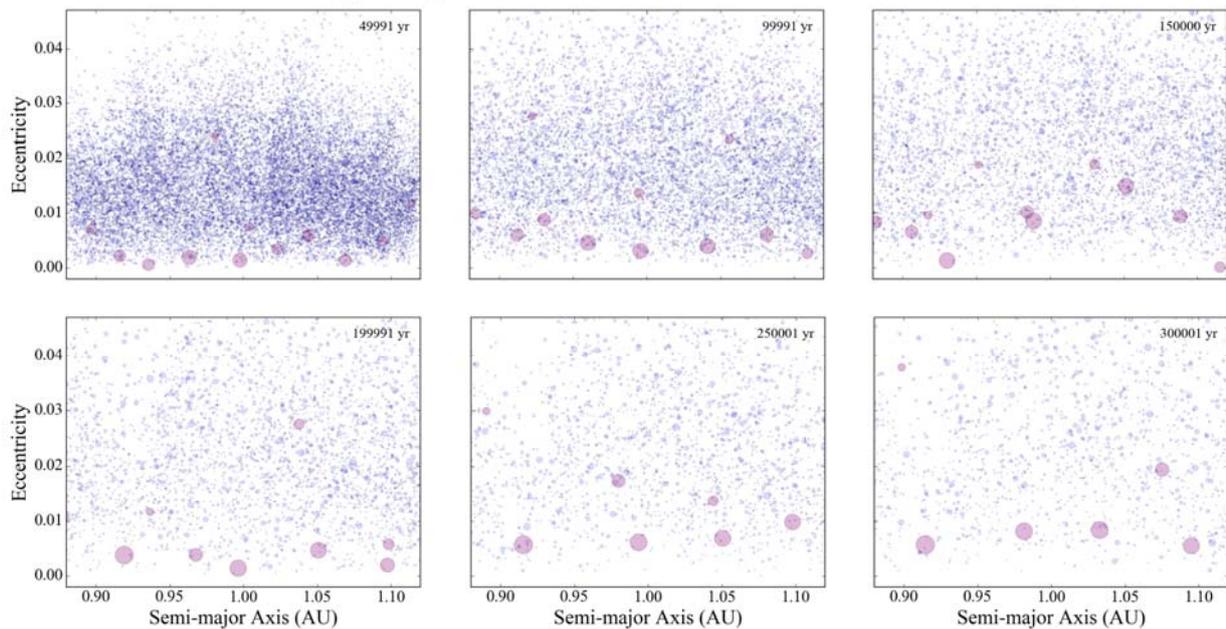


図 3 : 新しく開発した GPLUM で計算を行った際の軌道進化の図。縦軸が円軌道からのずれを示す離心率、横軸が太陽からの距離を示す軌道長半径となっている。丸の大きさの違いは質量の違いを示し、赤丸は原始惑星(質量が 10^{25} g 以上の天体)を表す。この図から、原始惑星が数個、数万年後に形成されていることがわかる。

(2) 星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーション

大阪大学では米国 Princeton 大学を中心として共同で開発している Athena++コードを用いて星形成過程及び原始惑星系円盤の研究を行っている。今年度は星形成過程の初期条件となる分子雲形成過程について、特に磁場の効果に着目した系統的なシミュレーションを行い、ガス雲が圧縮される方向と磁場の間の角度と分子雲の形成効率や分子雲の乱流や磁場の構造との間の関係性を明らかにし、*Astrophysical Journal* 誌から出版した (Iwasaki et al. 2019、図 4)。さらに、個々の星形成過程の初期条件となる分子雲コアの形成過程を明らかにすべく、前年度実装した自己重力ソルバを用いた更なる高解像度計算を現在進めており、原始星・星周円盤形成過程の初期条件を可能な限り第一原理的に明らかにすることを目指している。

また原始惑星系円盤の研究では、Oakforest-PACS を用いた大規模な大局的非理想磁気流体シミュレーションを本格的に開始した。現在結果を解析中であるが、原始惑星系円盤が各領域の電離状態によって、非理想磁気流体効果が働かず磁気回転不安定性によって乱流になる領域 (active zone)、オーム散逸及び両極性拡散により磁場が散逸して層流的な領域 (dead zone) 及びその中間的な領域に分化し、複雑な構造となることを示した。また、円盤内縁付近の磁気回転不安定性によって乱流的になっている領域において、自発的に円環状の構造が形成されることを見出した (図 5)。この領域は ALMA によって原始惑星系円盤内に観測されているリング・ギャップ構造とは異なるスケールであるが、同様の物理過程が働けばリング・ギャップ構造の起源として新たな機構を提案できるだけでなく、惑星形成過程におけるダスト集積・微惑星形成の現場として重要となり得るため、現在その起源を追及している。

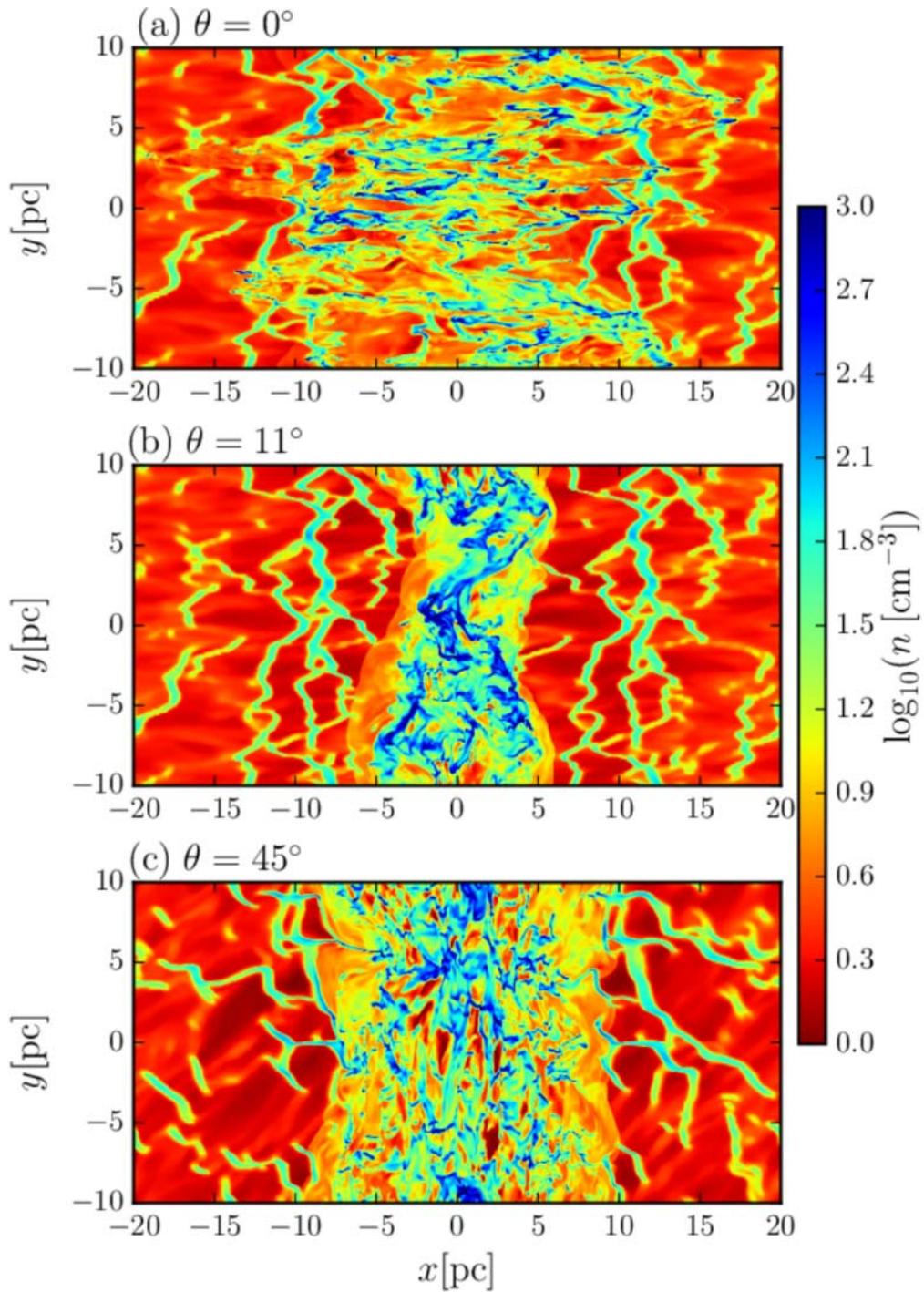


図4：衝突するガス流中での分子雲形成過程の磁気流体シミュレーション。色はガス密度の分布を表し、 $n \geq 10^3 \text{ cm}^{-3}$ (濃青色)の領域が分子雲である。衝突流の方向と磁場との角度によって形成される分子雲の構造や駆動される乱流が変化する。その結果比較的角度が小さい場合 (図中段) ガスが最も強く圧縮され、分子雲の形成効率が最大になることを見出した。(Iwasaki et al. 2019)

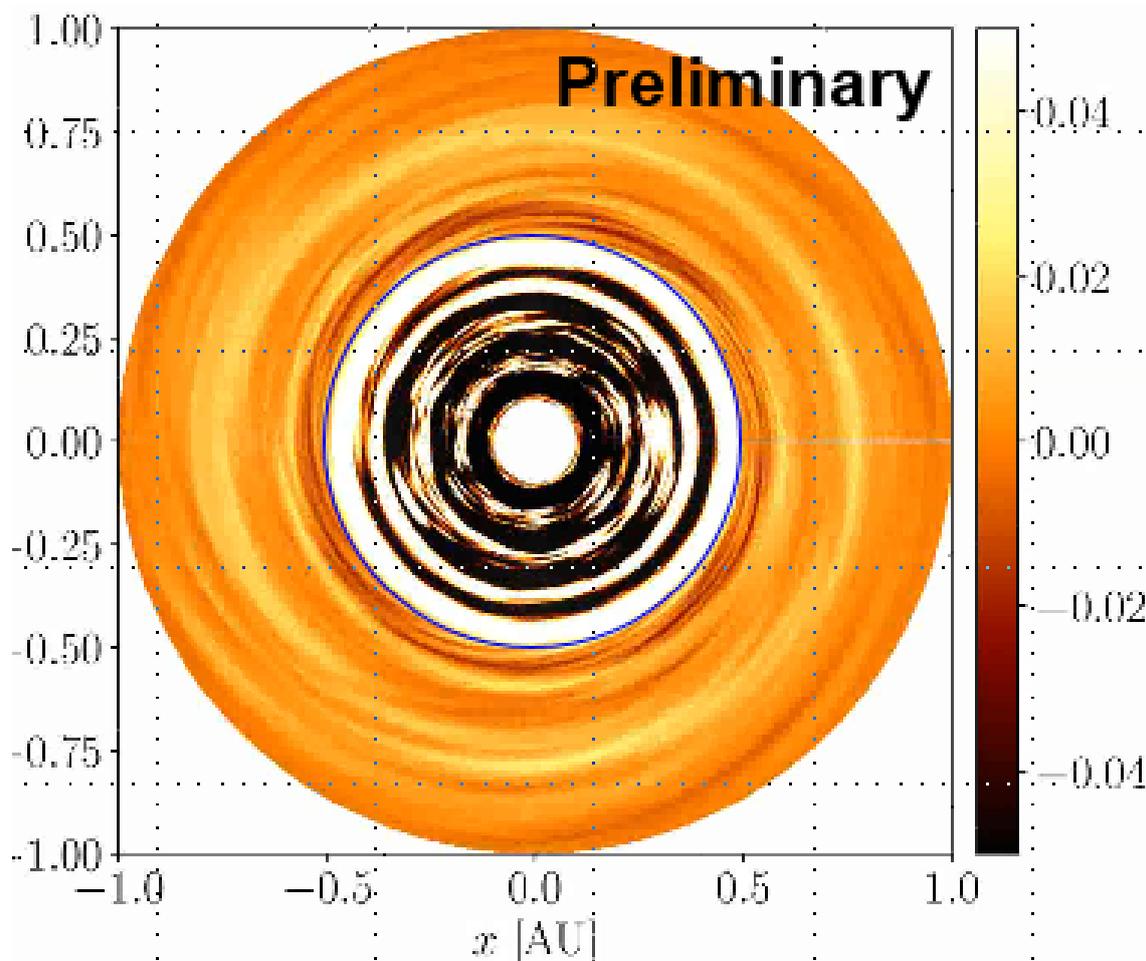


図5：原始惑星系円盤の非理想磁気流体シミュレーションにおける面密度の分布。中心星から半径 0.5 au より内側が磁気回転不安定性によって乱流的になっており、それより外側では非理想磁気流体効果によって乱流は強く抑制される。内側の乱流になっている領域内に顕著なリング・ギャップ状の構造が形成されることを見出した。その物理的起源について現在解析を進めている。

4-2-2. サブ課題B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

平成30年度において、サブ課題Bでは「岩石惑星の火成活動～マンテル対流系の三次元球殻モデリング」「ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで」「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」という3つの球対流の高解像度数値計算を行うことを目標として、研究テーマ間での計算技術に関する情報共有を図りつつ、それぞれのモデル開発を進め、「京」上での大規模計算の実装実験を実施した(4-1. 実施計画②⑧⑨⑩に対応)。

(i) 岩石惑星「岩石惑星の火成活動～マンテル対流系の三次元球殻モデリング」

月の内部進化を想定したマンテル対流計算に関しては、マグマの生成移動を含むマンテル対流の数値モデルを開発し予備的な数値計算を実現した。まずは球殻計算へ至る準備として二次元円環領域でのマンテル熱対流の数値実験を行った。現実の月でProcellarum-KREEP terrain (PKT) とよばれる地域に見られるような、放射性元素に富む地殻が局所的に存在する場合、マンテルにはグローバルな球関数の次数1の対流パターンが生まれて、マグマがこの領域に向かって集中するという結果を得た。この結果を参考に、局所的に放射性元素に富む地殻が存在する場合の三次元球殻でのマンテル対流の数値シミュレーションを実施したところ、図6の様な対流パターンが得られた。「京」で16ノード使用時に1タイムステップあたり最大で180秒程度の計算時間を要した。今後は、45億年前の月形成時の熱的初期状態が、その後の内部進化、特にマグマの生成移動にどのような影響を及ぼすかを検討する。

プレートテクトニクスの三次元モデルに関しては、粘性率の応力履歴依存性を考慮することにより、三次元矩形領域におけるプレート運動を伴うマンテル対流の数値シミュレーションに成功した。図7に示されるように、粘性率の低い帯状の狭いプレート境界域を境に、地表面が4つの剛体の板のように運動するプレートに分割されている様子が分かる。プレート運動によるリソスフェアの変形はプレート境界域に集中し、この領域でのみ、渦度の鉛直成分が大きな値をとるという現実の地球のプレートテクトニクスで見られる特徴を再現する事に世界で初めて成功した。さらに、プレート運動は数十億年のスケールで安定して起こり、その結果、熱流量は海嶺からの距離の平方根に逆比例することも確かめられた。

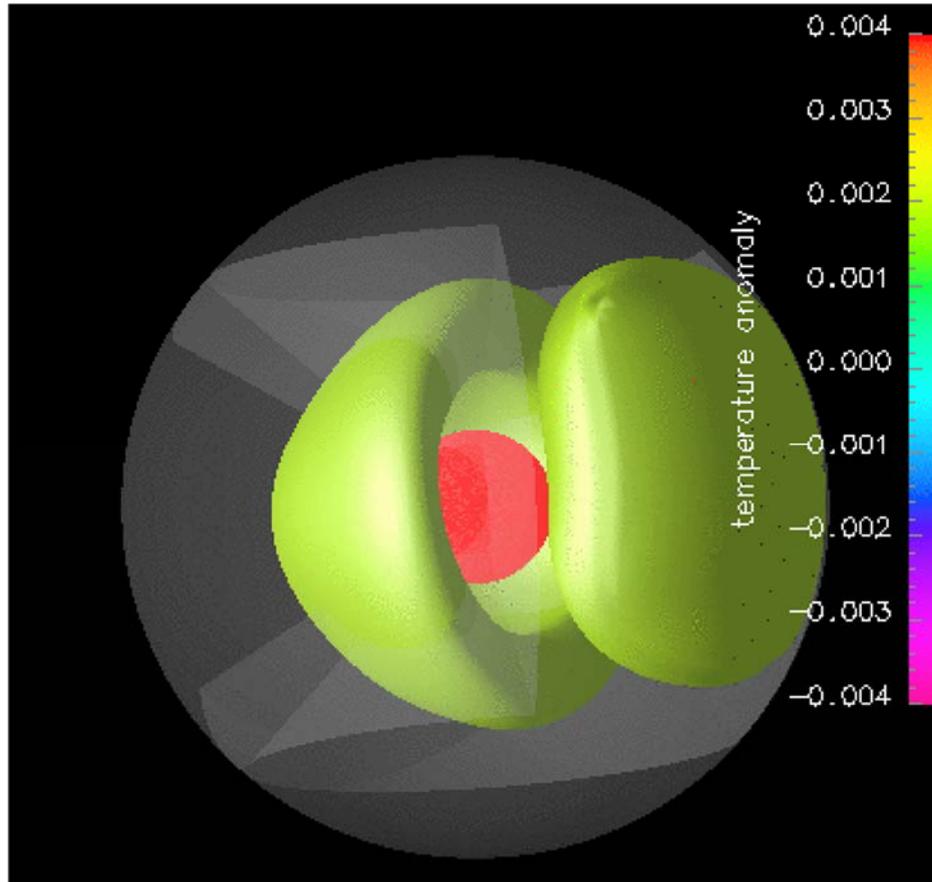


図 6 : 三次元球殻モデルにおける熱対流の数値シミュレーションの 1 コマ。緑色の曲面は水平平均温度からのずれが正で一定の等温面を表す。赤い曲面はコアを表す。図の右側の高温部分が、放射性元素に濃集した地殻領域に対応する。

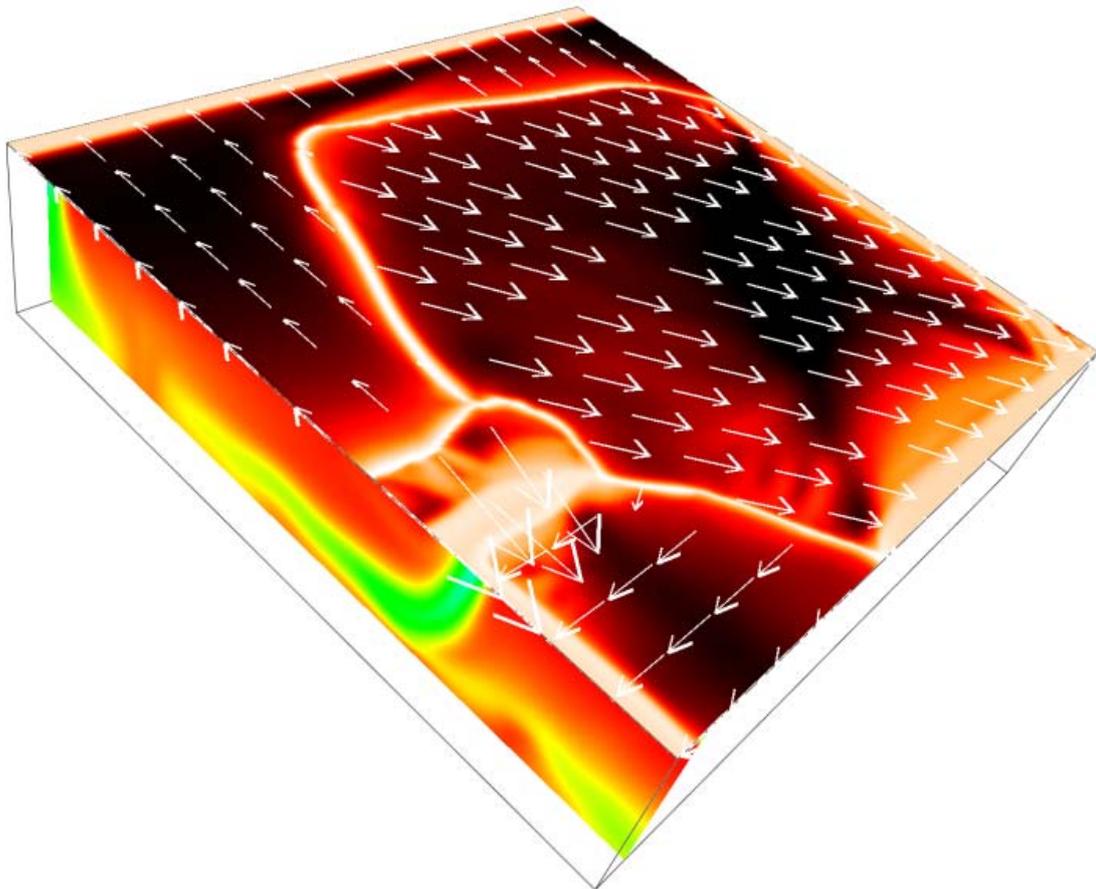


図7：プレートテクトニクス of 三次元モデルの1コマ。上面が地表面で、この面における粘性率の分布（カラー、明るいほど粘性が低い）とプレートの速度分布（矢印）を示す。また、手前の鉛直断面に、この面内の温度分布を示す。計算領域のサイズは東西・南北に12000 km、深さは3000 km。

(ii) ガス惑星「ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで」

平成 29 年度までの成果に基づいて、ガス惑星大気シミュレーション計算の高解像度長時間積分を行うためのスペクトル変換ライブラリのさらなる開発と改良を行った。Intel Xeon 向けのチューニングとして、SIMD (AVX、AVX2、AVX512) 命令とキャッシュが活用できるようにコードを再設計し実装した。加えて、多層用モデルでの層方向並列化を可能にするためにコミュニケータ分割が可能になるようライブラリインターフェースを改良した。さらに漸化式の工夫によるスペクトル変換の高速化を図った (Ishioka, 2018)。また、経度方向の格子点数が 2、3、5 の素因数の場合へと拡張し、緯度方向等間隔分点への切り替えをサポートし、より効率的な格子点の選択を可能とした。

表 1 に、Intel 系 CPU と「京」での変換速度のベンチマーク結果を示す。Haswell 系 Xeon CPU に対してはピーク性能に近い計算速度を出すことに成功した。Skylake 系 Xeon CPU ではピーク性能の 6 割程度の性能であるが、さらに上位の CPU であればより良い性能が発揮されると期待される。「京」でもピーク性能の 5 割に達しており、アセンブリコーディングの恩恵がなくても十分に性能を引き出すことに成功している。

今後は、本年度に開発改良したスペクトル変換ライブラリをガス惑星大気モデルに導入することで、高解像度長時間積分を大規模並列計算により遂行できる展望が開けると期待される。

表 1: スペクトルデータと格子点データの変換における実効 GFlops 値。Intel 系 CPU については、Haswell Xeon E5-2699v3 と Skylake-W Xeon W-2135 を使用し、コンパイラは gfortran 4.9.2 を用いた。M は球面調和関数切断波数（経度方向）を表す。

	スレッド数	M = 1023		M = 8191		理論ピーク値
		正変換	逆変換	正変換	逆変換	
Haswell	36	640	510	920	760	1094
Skylake	6	250	240	430	400	768
「京」	8	33	28	66	52	128

(iii) 惑星大気「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」

「惑星大気」においては、「京」などの大規模計算機上での並列計算に適した正二十面体準一様格子に基づく非静力学全球大気モデル (SCALE-GM) に、神戸大学・北海道大学・京都大学において開発してきた汎惑星大気静力学スペクトルモデル (DCPAM) から、火星大気の物理過程ルーチンを移植する形で、モデル開発を進めている。平成 30 年度は、前年度までに移植した火星放射ルーチンに加えて、鉛直乱流混合・地表面フラックス・土壌モデル・フラックス陰解法の各ルーチンを SCALE-GM に移植した。これにより、土壌の熱伝導をふまえた大気の時間発展計算が可能になった。その後、火星化した SCALE-GM での三次元計算を試行した。試行錯誤の結果、非静力学モデルにおける火星設定下での計算不安定を防ぐために必要な鉛直グリッド・水平拡散・スポンジ層の取り方などの設定を求めることに成功した。そして、低解像度設定 ($dx = 240$ km) で 1 火星年の時間積分を実施し、DCPAM による火星計算と、同様の季節変化が得られることを確認した。

次に、水平格子間隔 $dx = 240$ km から 1.9 km までの様々な解像度で火星大気三次元計算を実施し、数値解の解像度依存性を調べた。結果、 $dx \leq 15$ km の高解像度計算では、昼間に地表付近で生じる鉛直対流が表現されるようになることが分かった (図 8)。ただし、卓越する鉛直対流の水平スケールは、モデル解像度に依存して小さくなり、 $dx = 1.9$ km 計算では 10~30 km 規模であった。観測から示唆される鉛直対流の水平スケールは 5~10 km 程度であり、これを表現するためには格子間隔 1 km 以下の高解像度計算が必要であることが示唆された。また、これらの鉛直対流は、熱の上方輸送を担い、平均子午面循環場に影響を与えていた。すなわち、火星大気シミュレーションにおいて、小規模な鉛直対流を陽に表現することが、大規模場を表現する上でも重要であることが分かった。

また、「惑星大気」においては、SCALE-GM の金星大気への拡張を見据え、かつ、我が国の金星探査機「あかつき」の探査結果を活用したモデルの開発改良を同時に進めるため、「地球シミュレータ」に最適化された静力学スペクトルモデル (AFES) を用いた金星大気力学の数値実験を、「地球シミュレータ」で実行可能なレベルでの高解像度計算を実施している。前年度までに、「あかつき」によって発見された金星大気の高緯度から低緯度にかけて雲の薄い領域が斜めに延びる惑星規模の筋状構造をシミュレーションで再現することに成功していた。今年度は、そのシミュレーションデータを詳細に解析することで、この筋状構造の形成メカニズムを解明した。すなわち、波数 1 の赤道ロスビー波の位相が、高緯度で生じる傾圧不安定によってもたらされるジェット気流によって、南北に傾けられ、南北風の収束帯が斜めに生じることで、筋状構造が形成されることが分かった。この成果は英国の科学誌 Nature Communications に掲載された (Kashimura et al., 2019)。加えて国内外にプレスリリースを配信し、大きな注目を集めることができた (図 9)。今後も、金星大気の数値計算と解析を継続し、分厚い大気に関する情報を集積、SCALE-GM の計算可能領域の拡張に資する予定である。

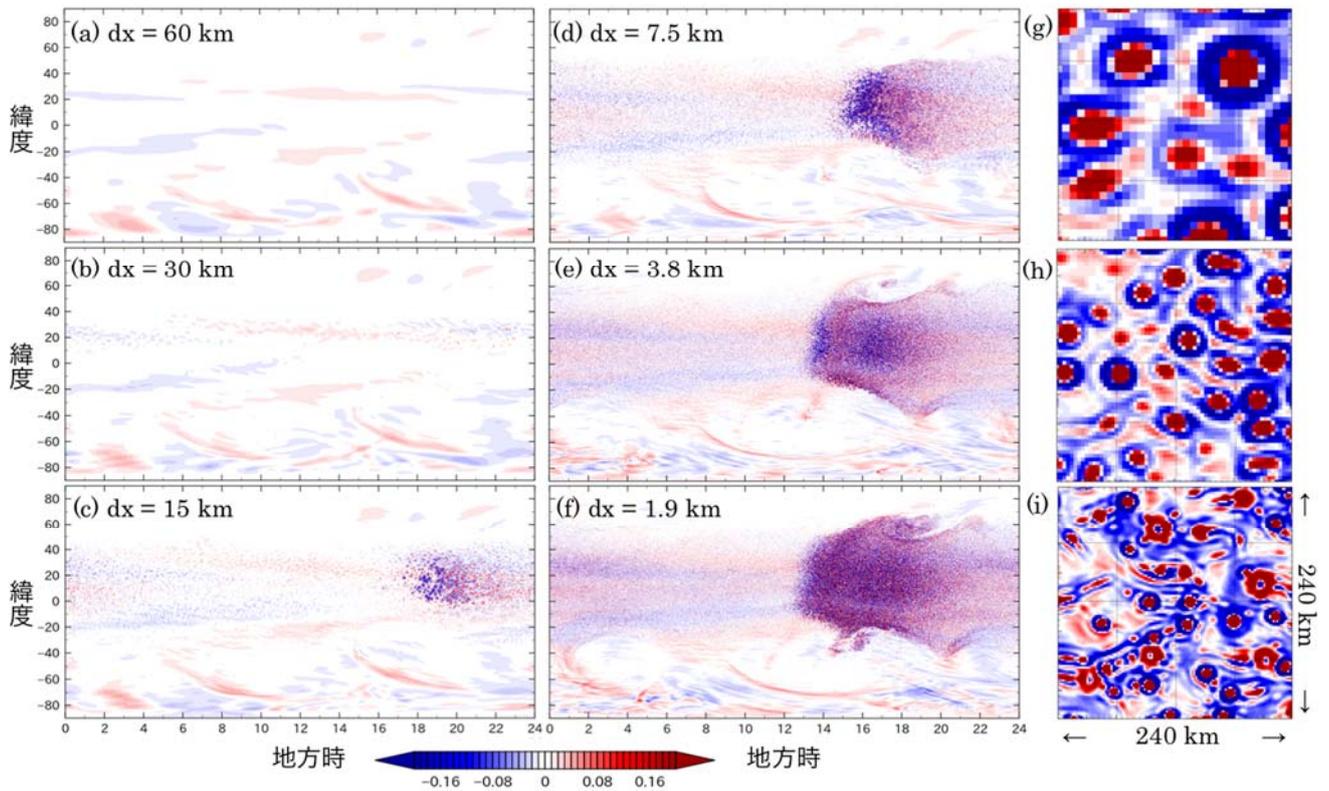


図 8 : 火星大気計算の解像度依存性。北半球の春分から約 30 日後の高度 2 km の鉛直流 [m/s] の瞬間場。水平格子間隔 $dx =$ (a) 60 km、(b) 30 km、(c) 15 km、(d, g) 7.5 km、(e, h) 3.8 km、(f, i) 1.9 km の場合。パネル (g, h, i) はそれぞれ (d, e, f) の拡大画像 (鉛直対流が発達しはじめる地方時の赤道付近) であり、 $4^\circ \times 4^\circ$ ($\sim 240 \text{ km} \times 240 \text{ km}$) の領域を表している。

(a) あかつき IR2 カメラによる観測 (b) AFES-Venus によるシミュレーション

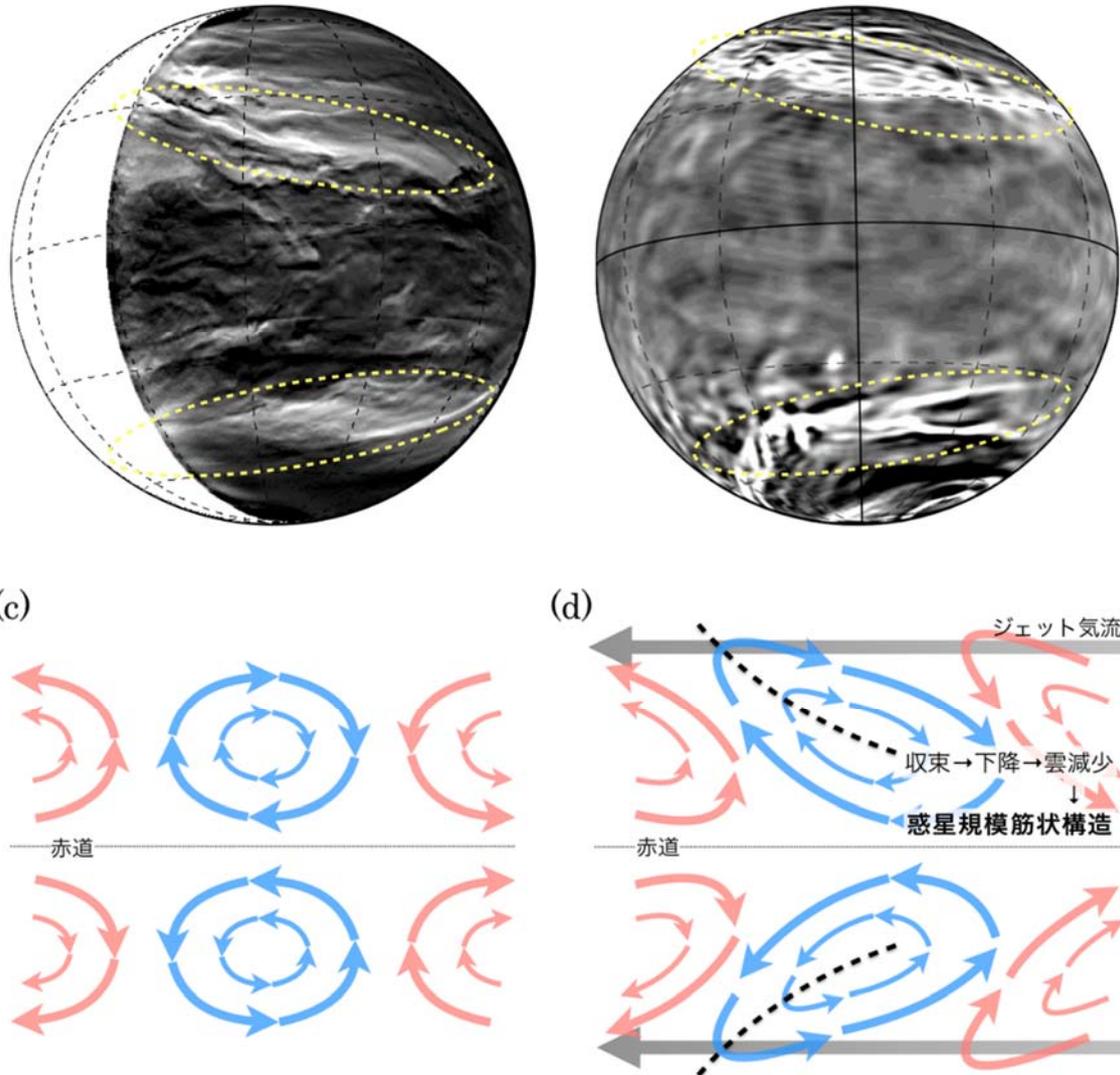


図9：プレスリリースに用いた図。(a) 金星探査機「あかつき」2 μm カメラ IR2 が撮像した金星夜面の画像。IR2 は下層大気から射出され、下層大気を通ってきた赤外線を観測するため、雲の薄い領域が白く見える。惑星規模筋状構造が黄色破線で示されている。(b) AFES-Venus で再現された高度 60 km の鉛直流分布。下降流を白く表示している。(c, d) 形成メカニズムの概念図。赤道ロスビー波によって生じる渦 (c) が高緯度のジェット気流によって傾き (d)、収束・下降流帯が形成され、筋状に雲が減少した領域が形成されることで、惑星規模筋状構造が形成される。(a, b) は Kashimura et al. (2019, Nat. Commun.) の図を一部修正したもの (CC BY 4.0 <https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)。

4-2-3. サブ課題C「太陽活動による地球環境変動の解明」

平成30年度において、サブ課題Cでは太陽の表面から対流層の底までの一貫した計算による黒点の拡散・形成の再現、多層格子電磁流体力学コードを用いた太陽面爆発現象の再現、および地球磁気圏と衛星環境を再現するMHDシミュレーションとプラズマ粒子シミュレーションの連成計算フレームワークの開発を進めた(4-1. 実施計画③⑪⑫に対応)。

(1) 太陽対流層のシミュレーション

これまでに開発したR2D2(Radiation and RSST for Deep Dynamics)コードを用いて、これまでになく深い計算領域での黒点の拡散・形成を再現した。これまでに磁場のない状況では、太陽の表面から対流層の底までの一貫した計算が可能になっていたが、黒点のような極端な状況を計算するためにはいくつかの対策が必要であることがわかった。R2D2コードでは、初期条件として太陽標準モデルであるModel S(Christensen-Dalsgaard et al., 1996)を用いている。太陽深部での微小な擾乱を正しく取り扱うために、Model Sからの擾乱の方程式を解いているが、黒点のように背景場から大きな変化を伴う現象の時は、Model Sをそのまま背景場として使うのには問題があり、非物理的な発光などを伴うことがわかった。そこで我々は、背景場としてエントロピーがスムーズな分布となるようにModel Sを変更し、黒点を扱う上で問題が起こらないように対策した。また、本研究で用いている人工粘性は、擾乱量のみに対して作用させているが、こちらも黒点を扱う上では非物理的な密度分布を示すことがわかった。そこで、黒点が存在するような領域に対しては、擾乱+背景場に対して人工粘性を作用させることとした。この対策によって、R2D2で黒点を適切に取り扱うことが可能になった。また、黒点上空の大きなアルフベン速度の対策としてはRempel et al. (2009)のアルフベン速度抑制を採用することにした。

このように改良した数値計算コードを用いて、これまでになく深い計算領域での黒点の拡散と形成を再現し調査を行なった。これまでの黒点の計算においては、10 Mmほどの深さの計算領域が用意されていたが、本研究ではR2D2の計算性能を最大限に生かして、140 Mmの深さの計算領域を用意した。このように深い計算領域を用いる場合は、内部の熱対流構造が、黒点の拡散・形成に大きな影響を与えることがわかった。黒点の拡散については、上昇流に黒点がある場合は、乱流的な流れを避けることができるので、黒点の拡散を抑制する効果がある一方で、下降流に黒点がある場合は、黒点を支えるような流れとなり、黒点の寿命を延ばす効果があることがわかった。結果として、黒点の足元が深い場所にある場合は、上昇流・下降流の違いで黒点の寿命に大きな違いはなかったが、特に下降流においては、磁場が強い時よりも弱い時の方が、黒点の寿命が長くなるという興味深い結果が得られた。また、黒点の足元が浅い場所にある場合は、上昇流にある場合に顕著に短い寿命を示した。さらに、黒点の形成においても深部熱対流の影響を詳しく調べた(図10)。形成に関しては、深部の熱対流の状況が大きく影響することがわかった。このように黒点について、太陽深部と表面をつなげることに成功したので、今後は本サブ課題内の太陽フレアグループと協調し、さらに太陽外層まで計算を接続する可能性を模索する予定である。

t= 24.00 [hour]

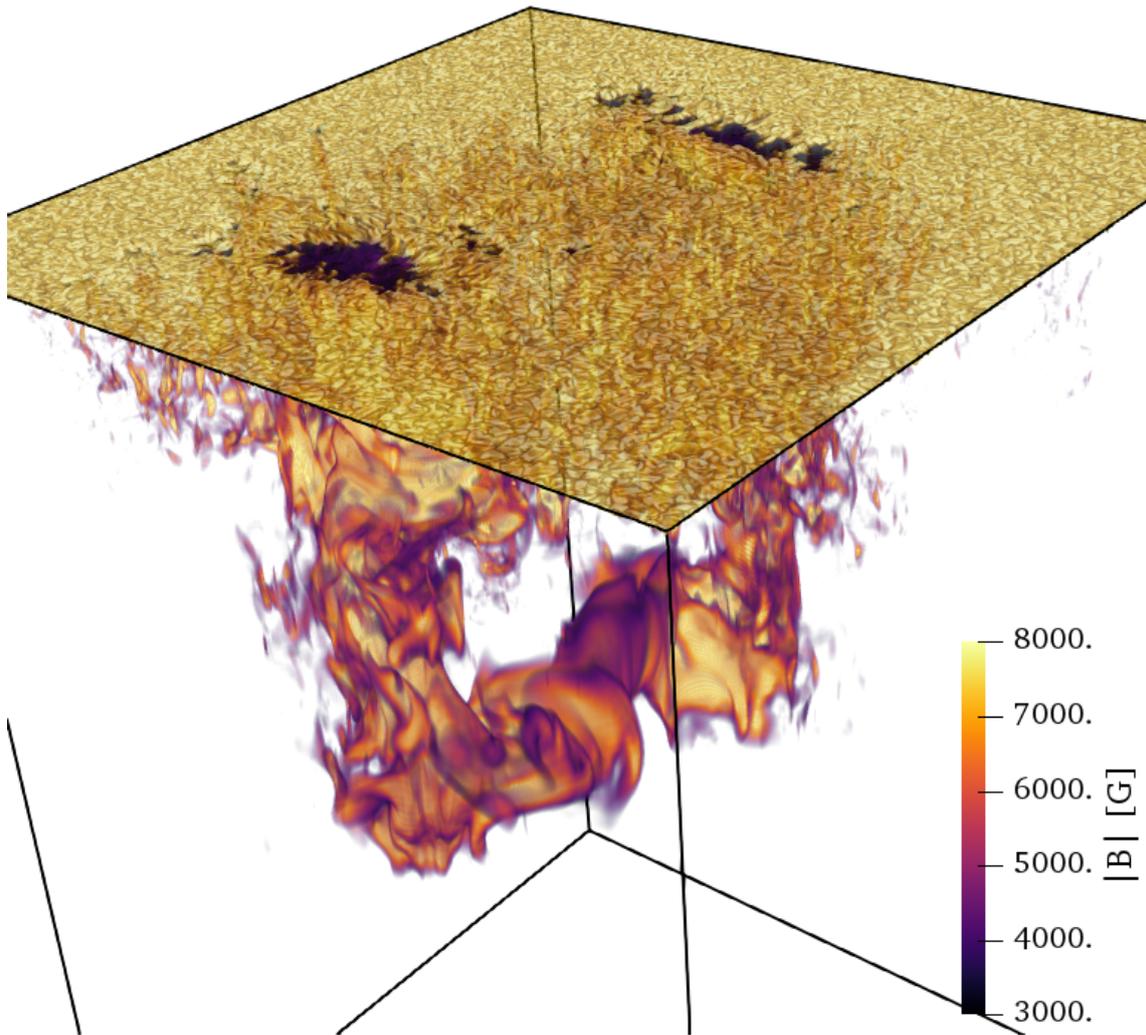


図10：深い計算領域において、太陽表面で黒点が形成される様子を再現した計算結果。3次元ボリュームレンダリングで磁場強度を表し、黄色がかった面が太陽表面での放射強度を表す。水平方向にそれぞれ100 Mm、鉛直方向に140 Mmの計算領域を表している。

(2) 太陽面爆発（フレア、コロナ質量放出）の発生機構と予測に関するシミュレーション

昨年度に開発した多層格子電磁流体力学(MHD)コードを用いて、太陽活動領域(AR)12017で発生したX1.0フレア(2014年3月29日に観測)の再現を実施した。X1.0フレアが発生する数十分前に、活動領域の局所領域において、特徴的な磁場の変動が観測されており、Woods et al. ApJ, 860, 163 (2018)では、この磁場変動がフレアの発生機構と強く関係していることを指摘している。本研究ではまず、フレア発生30分前の太陽表面の活動領域磁場から、フォースフリー近似に基づいて上空の磁場を数値的に外挿することで、3次元のコロナ磁場を導出した(図11)。次に、Woods et al. で指摘されている領域に、磁場擾乱を与えることで、フレアが発生するかどうかを検証した。本計算では、 $256 \times 256 \times 256$ の格子を3層用意し、磁場擾乱を与える領域に多層格子で最も細かい格子点で構成される層を配置した。

与えられた磁気擾乱が平衡コロナ磁場と相互作用した結果、図11(b)に示すように、螺旋状にねじれた磁力線群である「磁気フラックスロープ」が形成され、上空へと放出されていく様子が再現された。形成された磁気フラックスロープの足元の分布と、フレア時に太陽表面付近で観測される電磁波の発光現象である「フレアリボン」との分布がよく似ていることから、形成・放出された磁気フラックスロープは観測を概ね再現していることが示唆された。その一方で、磁気フラックスを放出させるために与える磁気擾乱の磁場の強さが観測値と合わないなどの問題点も残されている。光球面磁場の時系列データから、磁気中性線に向かって流れるプラズマ流も観測されており、この収束流とフレア発生の関係性も指摘されている(Vemareddy ApJ, 845, 59, 2017)。今後はプラズマの収束流をも取り込むように境界を改良し、また計算領域を広げることで、磁気フラックスロープを長時間追跡し、コロナ質量放出の形成過程に迫る。また、観測データではなく、太陽対流層計算から得られた黒点を境界条件としたフレアの発生実験も実施することで、太陽対流層からフレアまでの連結実験も実施する。

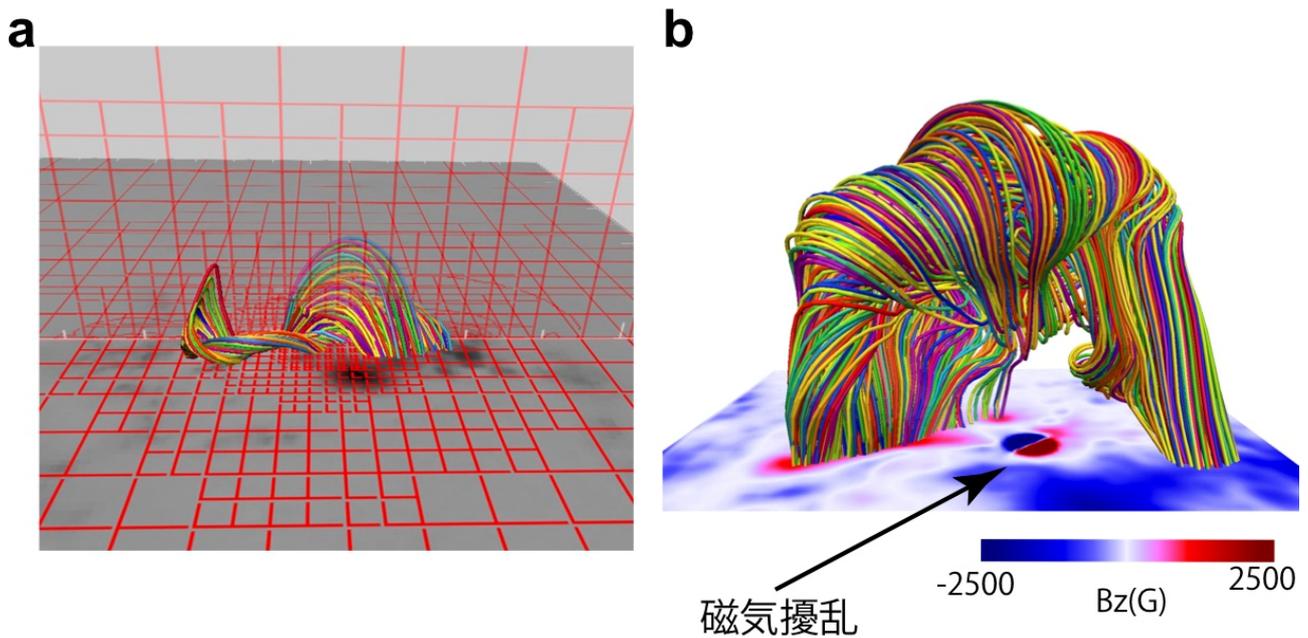


図 1 1 : (a) X1.0 フレア発生前の太陽表面磁場から外挿されたコロナ磁場。カラーで描かれた線は磁力線を表しており、赤い線は計算格子を表している。磁場擾乱が与えられる領域に、一番細かい計算格子が配置された。(b) 螺旋状にねじれた磁力線群である「磁気フラックスロープ」が放出していく様子を表している。(a)は水平及び鉛直方向それぞれ 100 Mm の計算領域、(b)は水平方向 40 Mm、鉛直方向 30 Mm 程度の磁気フラックスロープを表している。

(3) 地球磁気圏と人工衛星環境のシミュレーション

本サブグループの研究開発目標は太陽面爆発に伴って生じる擾乱が、地球磁気圏構造と高エネルギー粒子環境、ひいては人工衛星周辺環境のいかなる擾乱につながるかを、定量的に評価する数値フレームワークを構築することである。とりわけ地球電磁気環境変動の詳細な物理描像と、人工衛星システムという社会インフラとの間の関わりを、経験則に頼らず物理法則に基づいて評価するため、

1. 地球磁気圏グローバルMHDシミュレーション
2. 地球磁気圏高エネルギー粒子環境のマイクロ物理プロセスPICシミュレーション
3. 人工衛星近傍電磁気環境擾乱のPICシミュレーション

を組み合わせた「MHD・PIC連成シミュレーションモデル」を構築し、次世代スーパーコンピュータに高効率に実装することを目指す(図12)。平成30年度の取り組みとして、各シミュレーションモデルの独立性を維持しつつ、モデル間の情報伝達を高効率なプロセス間通信で実装するための連成フレームワークの開発に着手した。具体的には次の2つの技術要素について開発を行った。

- ・ MPMD(Multiple Program Multiple Data)連成モジュール：割り当てられた計算資源の各モデルへの振り分けや、一方のモデルの計算条件に応じて、他方のモデル計算開始を動的にトリガーする役割を担うモジュールを作成した。当該モジュールを各モデルコードにインクルードすることで、別個にビルドしたプログラムを並行実行し、かつ必要に応じて情報伝達を実施することが可能になる。
- ・ 片方向通信モジュール：実行中の計算条件に応じて、通信パターンを動的に決定することを容易にするため、非同期の片方向通信を用いたデータ転送モジュールを作成した。これにより、一方のモデル計算で発生した特定の事象に応じて、他方のモデルへの情報伝達を実行するなど、イベントドリブンな連成計算モデルを容易に構築できる。

いずれもモジュールそのもののコーディングと動作確認を完了し、実際のシミュレーションモデル間を接続するベンチマーク計算を実施予定である。なお上述の取り組みは宇宙・地球科学よりむしろ計算科学分野に関する研究開発項目であるが、独立性を維持した連成フレームワークの利用により、ポスト「京」に向けた各モデルの最適化工程は従来通り独立に進めることが可能である点が今年度の成果の意義である。最終的には大規模宇宙嵐時のプラズマ波動発生条件と相対論的高エネルギー電子の加速効率、および宇宙嵐時の突発的衛星帯電現象を物理法則に基づいて予測可能になることが期待される。

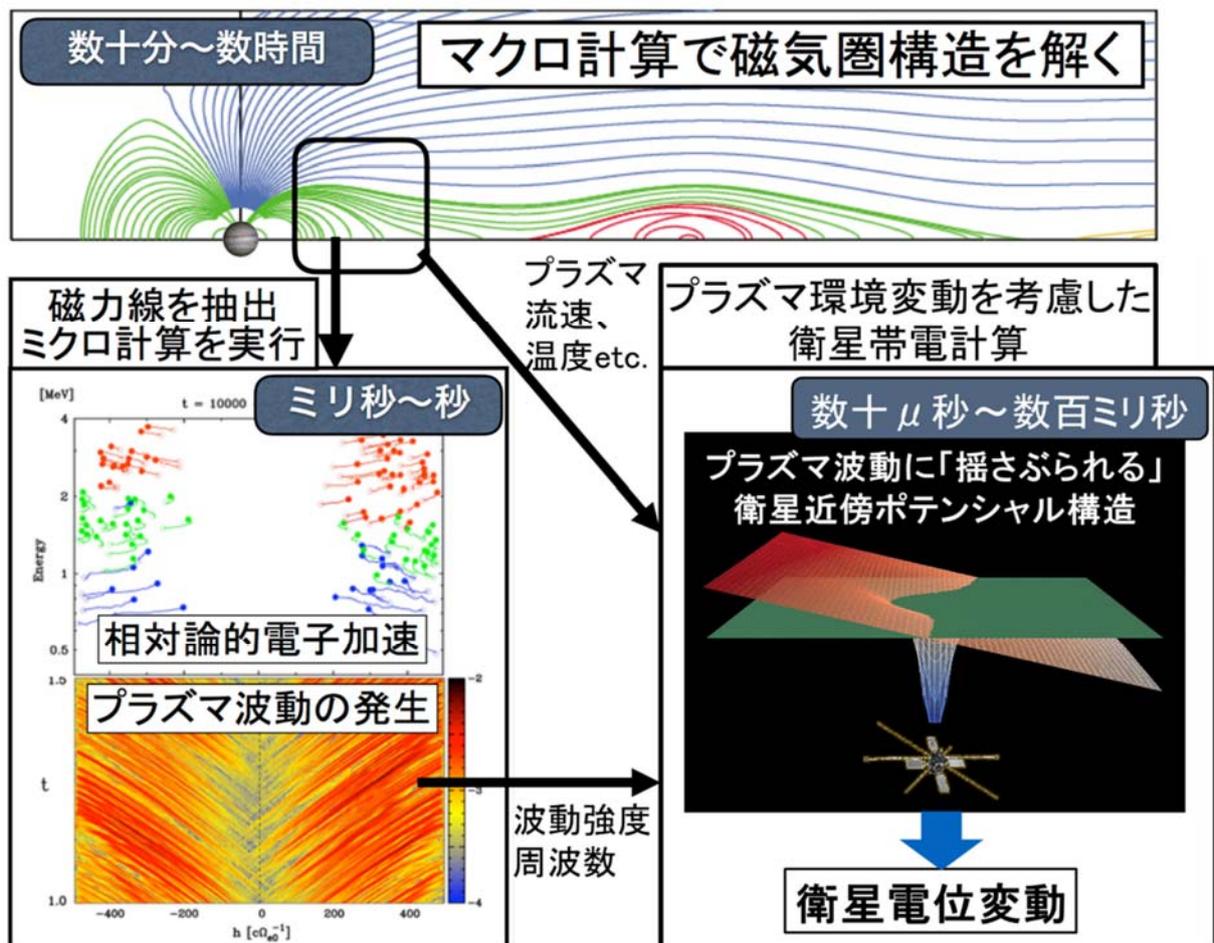


図 1 2 : MHD・PIC 連成シミュレーションモデルのコンセプト。これにより大規模宇宙嵐時のプラズマ波動発生と相対論的高エネルギー電子生成、および突発的衛星帯電が予測可能になる。

4-2-4. サブ課題D「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

平成30年度において、サブ課題Dでは星間有機分子の生成及び分解機構を解明するために第一原理分子動力学計算を実施、原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにするためにダストの衝突付着成長シミュレーションコードの開発を行った（4-1. 実施計画④⑬⑭に対応）。

(1) 第一原理計算による星間有機分子の生成及び分解機構の解明

(1-a) メタノール (CH_3OH) の光解離反応

星間ダスト上での複雑有機分子の生成において重要なラジカルの生成メカニズムを明らかにするため、電子状態間遷移を考慮した *ab initio* 分子動力学計算 (surface hopping simulation) を用いて、紫外線による有機分子 (メタノール: CH_3OH) の光解離反応の過程のシミュレーションを行った。 CH_3OH は星間氷の中にも比較的多く含まれており、 CH_3OH の光解離により生成するラジカル同士が反応することで、様々な複雑な有機分子が生成すると考えられている。しかし、 CH_3OH の光解離の詳細に関しては未だ不明な点も多い。例えば、水素原子の解離が起こる場合、気相中では $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ が多く生成するのに対し、固相 (氷) 中では $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ が多く生成されることが実験的に報告されているが、環境の違いによる生成物分岐比の違いの原因については明らかにされていなかった。昨年度に引き続き、時間依存密度汎関数理論 (TD-DFT) レベルで、様々な初期構造を用いて、電子励起状態でのダイナミクスシミュレーションを行った。電子励起状態では $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ が生成しやすいという結果が得られたが、これは気相中における CH_3OH の光解離反応の実験結果と対応している。加えて、今年度は、TD-DFT 計算による結果の妥当性を評価するため、結合解離に伴うエネルギー変化を、より高精度な量子化学計算 (CASPT2 法) を用いて計算したものと比較を行い、TD-DFT 計算が定性的に合うことを確認した。また、固相中では、気相中とは異なり $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ が多く生成される理由を明らかにするため、電子基底状態での反応の解析及び水素原子解離の代わりにプロトン移動が起こる場合についても検証した。これらの結果から、固相中では、電子基底状態に戻った後で解離が起こる割合が多いという可能性 (図13) と、ヒドロキシ基から水素原子が解離するかわりにプロトン移動が起こる可能性があることを明らかにし、固相中では $\text{CH}_3\text{O} + \text{H}$ よりも $\text{CH}_2\text{OH} + \text{H}$ が生成しやすい理由を説明した。本研究の成果を *Chemical Physics Letters* に発表した。

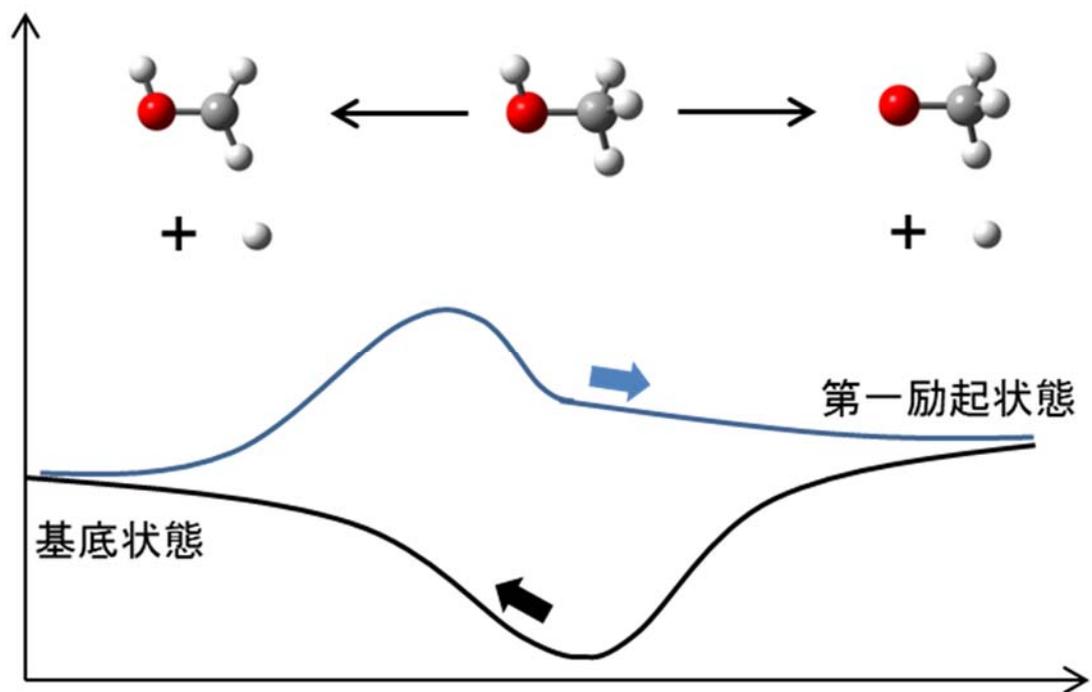


図 1 3 : CH₃OH 分子の電子基底状態と電子励起状態（第一励起状態）からの水素原子の解離。上段の分子モデルの灰色、赤、白の丸はそれぞれ炭素 (C)、酸素 (O)、水素 (H) を表す。横軸は解離水素原子の距離、縦軸はエネルギー状態を表す。第一励起状態では CH₃O + H が、電子基底状態では CH₂OH + H が、より生成しやすいことを示している。

(1-b) コンフォメーション探索アルゴリズムの開発

大規模で複雑な構造を持つ分子では、多くの安定構造（コンフォメーション）が存在するが、これらを解析することは、分子構造の解析や化学反応経路の解析において重要である。そこで、複雑分子系のコンフォメーションを、効率的かつ網羅的に探索することのできるアルゴリズムである GLocal Area Search (GLAS) を開発した。本手法では、局所安定構造の周囲に多数のウォーカーを生成し、ウォーカー間に反発ポテンシャルを加えることでウォーカーを広く分布させ、各ウォーカーを構造最適化させる（図 1 4）ことで、広範囲の構造空間を自動的に効率よく探索することのできる手法である。まず、グリシンなどの小規模有機分子において本アルゴリズムを適用して、性能の評価を行った。本手法は、計算コストが低く並列実行に適していることから、複雑分子系にも適応可能である。本研究の成果を Bulletin of the Chemical Society of Japan に発表した。

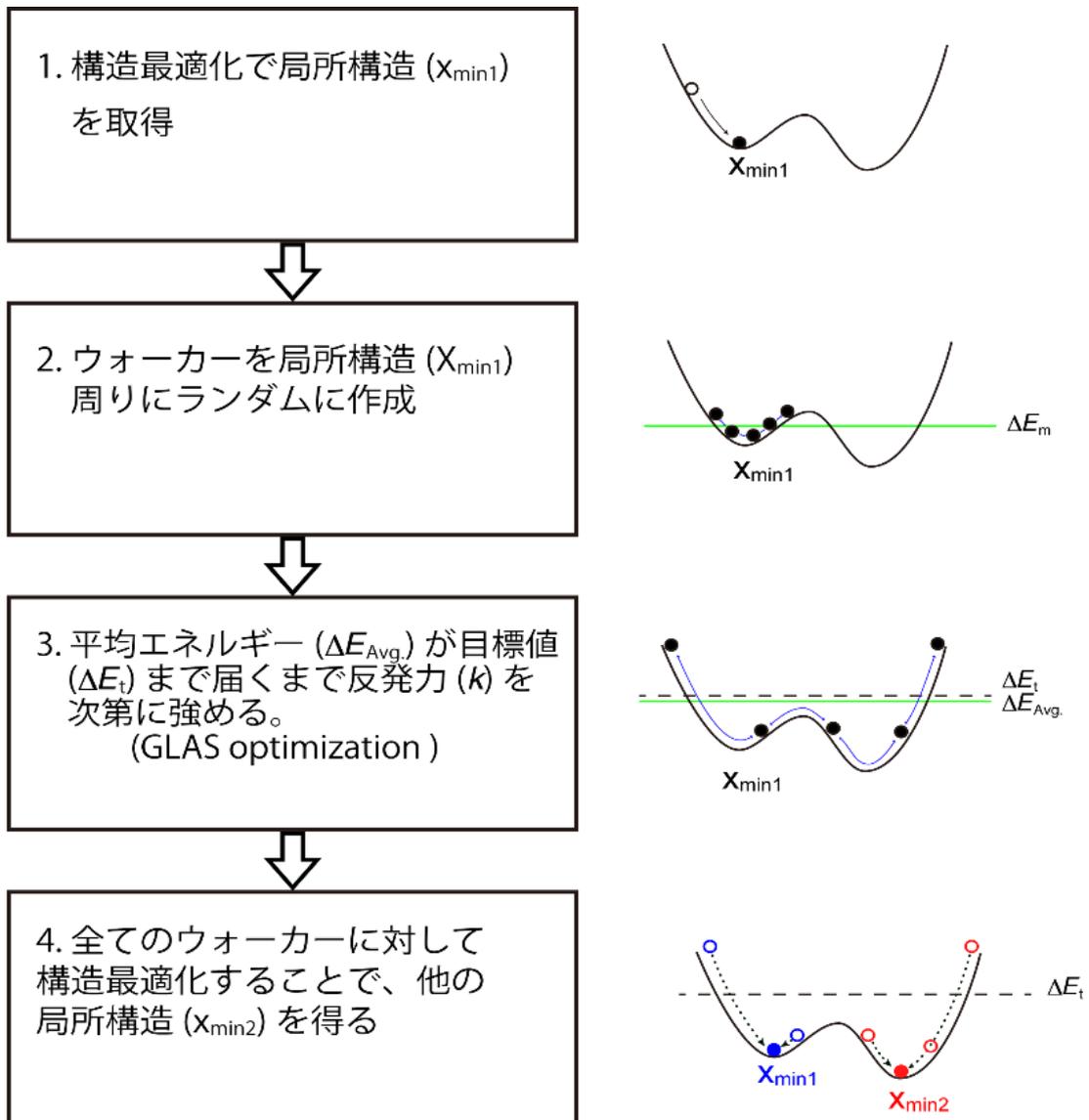


図 1 4 : GLAS 法の計算手続き。

(1-c) ダスト表面でのラジカル反応

星間空間における複雑有機分子生成において重要な星間ダスト表面におけるラジカル反応のメカニズムの詳細を明らかにするため、第一原理分子動力学計算を行った。ダスト表面モデルとしてグラフェン表面を用い、グラフェン表面に化学吸着している CHO と遊離 H の反応 (Eley-Rideal (ER) 機構) を、Car-Parrinello molecular dynamics simulation (CPMD) を用いて解析した。CHO の化学吸着の状態を 2 通り (C または H 原子においてグラフェン表面に吸着、図 1 5) 検証し、反応生成物の種類や生成後の移動の様子を解析した。CHO が H 原子でグラフェン表面に吸着している場合、多くのトラジェクトリーにおいて、遊離 H は CHO の C 原子と結合して CH₂O を生成したが、生成した CH₂O は、CHO がいた場所の近くにとどまっていた (図 1 5 (b))。一方、CHO が C 原子でグラフェン表面に結合している場合、主に CO + H₂ が生成し、生成した CO は垂直方向に (表面から解離する方向に) 移動していく一方、生成した H₂ は表面に水平方向に移動していくものが多いという結果が得られた (図 1 5 (a))。

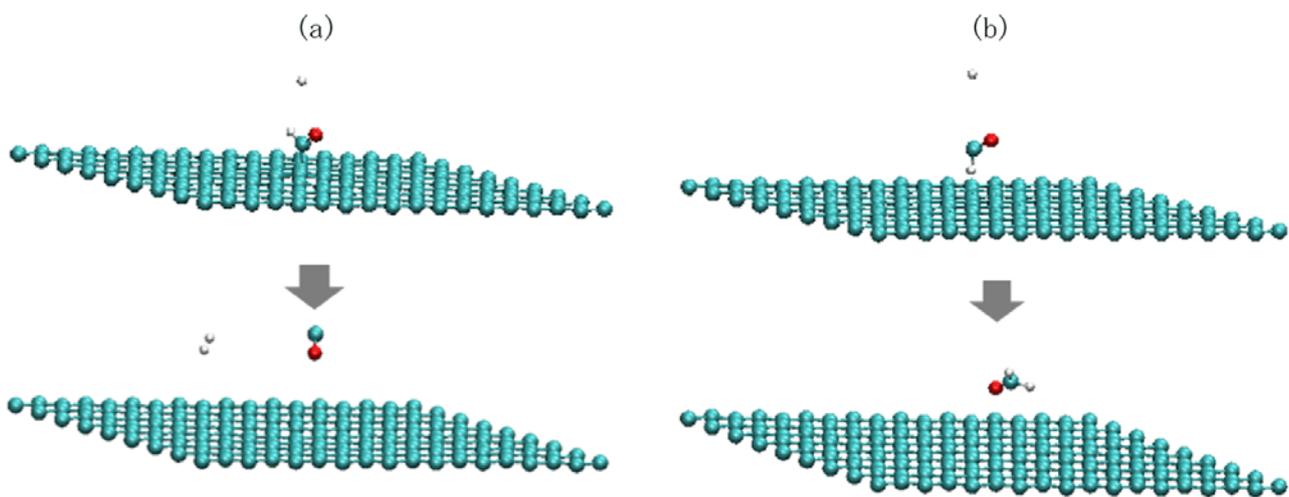


図 1 5 : (a) グラフェン表面に C 原子で吸着している CHO と遊離 H の反応により生成した CO+H₂。
 (b) グラフェン表面に H 原子で吸着している CHO と遊離 H の反応により生成した CH₂O。

(2) 原始太陽系におけるダスト成長過程の研究

原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を明らかにするため、「原始惑星系円盤乱流中のダストの衝突付着成長シミュレーションコードの開発」を行い、以下の3つの成果を得た。これによって、非線形性の強い原始惑星系円盤乱流の性質および乱流中の粒子の運動についての理解が大きく進展した。また、現実的な強乱流場中でもダストの付着確率が大きく下がることはなく、付着成長してきた粒子の付着率が高くなる「暴走的成長」が起こりえることを明らかにした。

(2-a) 非圧縮性及び圧縮性乱流場中のダストの衝突付着の比較

圧縮性乱流中のダストの平均衝突速度や衝突付着率等の統計を非圧縮性乱流における結果と比較し、圧縮性が弱い場合、基本的には非圧縮の場合と同等な結果が得られることを定量的に明らかにした(図16参照)。圧縮性乱流の直接数値計算における外力項の取り扱い方の見直しを行い、乱流場の圧縮性の強さをより細かく制御することが可能になった。これによって、圧縮性乱流場の統計的な準定常性を向上させることが可能となり、信頼性の高い結果による比較が実現した。また、乱流場の圧縮性が強くなると弱い衝撃波が現れ、慣性が小さい粒子の衝突付着の統計がわずかに影響を受けること、及び、慣性の大きい粒子においても衝突速度分布がわずかに変化し、付着率が若干高まることが明らかとなった。

(2-b) 圧縮性乱流場シミュレーションコードの高効率化

圧縮性ナビエ・ストークス方程式中の外力を数値的に制御することにより、圧縮性乱流場における圧縮成分と非圧縮成分の割合をある程度任意に設定できることを確認した。また、これにより圧縮性の強さの異なる多様な条件下での数値実験が可能となった。また、その外力の制御の方法を高効率化し、結果として、圧縮性乱流場のシミュレーションコードの高効率化に成功した。

(2-c) シミュレーション結果の解析手法の開発

開発したコードによる乱流中のダストの衝突付着成長シミュレーションでは、乱流による粒子のクラスタリングが乱流中のダストの衝突付着成長を促進すること(付着成長してきた粒子の付着率が高くなる「暴走的成長」が起こりえること)を示す結果を得た。乱流クラスタリングによる粒子の衝突付着成長促進の効果の原理を明らかにするため、乱流場のストレインテンソルの固有ベクトルを活用した解析手法(Elsinga & Marusic, JFM 2010)を応用し、流れ構造と粒子分布の関係を定量的に調べることを可能にする解析手法を開発した。その結果、乱流中の高渦度領域は慣性のある粒子の低密度領域を生成し、慣性の大きさに応じた特定の非等方的な密度分布を有することが分かった(Ishihara & Sakurai, JPSJ 2018)。また、高渦度領域の周りで平均化して得られた乱流場中の慣性粒子の振る舞いを調べた結果、慣性粒子は遠心力で高渦度の中心から吐き出されるが背景となるストレイン場によって中心からある程度離れた箇所に留まる傾向があること、また、そこでは慣性粒子同士が低速に接触しうることが分かった。これは粒子の「暴走的成長」が実現するシナリオのひとつとして考えられる。

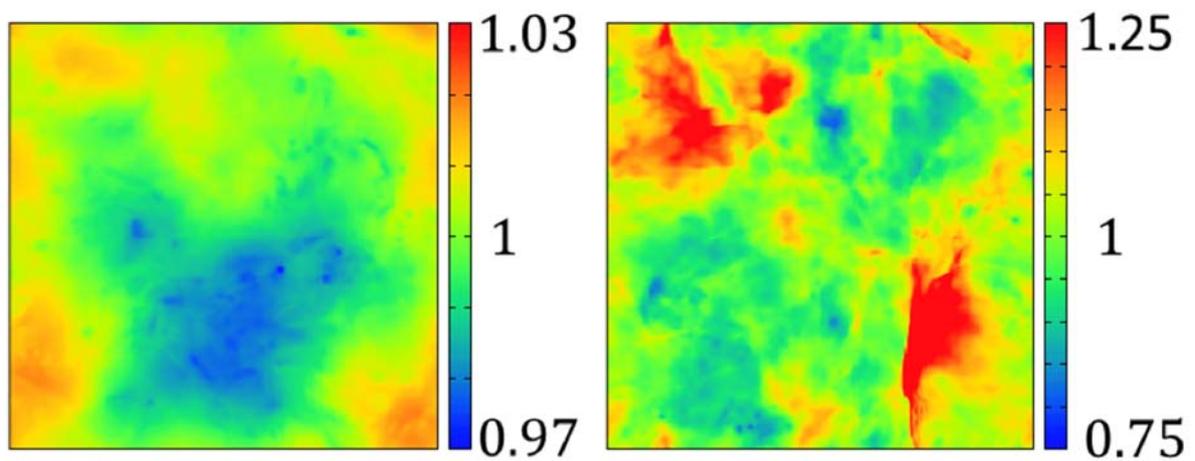


図 1 6 : 圧縮性乱流 ($Re=900$) のある断面上の密度分布; (左) マッハ数 $Ma=0.1$ 、 (右) $Ma=0.3$ 。 比較に用いた非圧縮乱流 ($Re=900$) では密度は一様 (=1) である。このように乱流場そのものは目に見える違いを有する場合でも、乱流中の粒子衝突に関する統計量、例えば、乱流による粒子のクラスタリングや衝突粒子の相対速度などには目立った違いがないことが定量的に示された。そして、圧縮性が弱い (Ma が 0.3 以下) 場合、粒子運動は主に乱流速度のソレノイダル成分 (渦運動) に支配されていること、また乱流速度の圧縮成分の存在はソレノイダル成分の性質に目立った変化をもたらさないことが明らかになった。

4-3. 活動（研究会等）

開催行事

日時/場所	活動名	参加者
平成 30 年 5 月 23 日 幕張メッセ	JpGU-AGU Joint Meeting 2018 での企画セッション「計算科学による惑星形成・進化・環境変動研究の新展開」	口頭発表：5 件 ポスター発表：6 件
平成 30 年 7 月 6 日 神戸大学 惑星科学研究センター	ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 本格実施フェーズ推進検討会議	出席者：4 名 TV 会議参加者：15 名
平成 30 年 8 月 3 日 神戸大学 惑星科学研究センター	FDPS 講習会 初級	出席者：22 名
平成 30 年 8 月 8 日 神戸大学 惑星科学研究センター	Formura first Workshop	出席者：19 名
平成 30 年 10 月 12 日 神戸大学 惑星科学研究センター	第二回 ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会	出席者：20 名 TV 会議参加者：4 名
平成 31 年 3 月 13 日 東京工業大学地球生命研究所 三島ホール	ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第 3 回 公開シンポジウム	出席者：33 名 TV 会議参加者：2 名

運営委員会

日時	会合名	参加人数
平成 30 年 4 月 6 日	第 9 回運営委員会	9 名
平成 30 年 7 月 6 日	第 10 回運営委員会	15 名
平成 30 年 10 月 23 日	第 11 回運営委員会	13 名
平成 31 年 1 月 22 日	第 12 回運営委員会	13 名

4-4. 実施体制

業務項目	担当機関	担当責任者
①サブ課題A「惑星の起源の解明」	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 牧野 淳一郎
②サブ課題B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 牧野 淳一郎

③サブ課題C「太陽活動による地球環境変動の解明」	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 牧野 淳一郎
④サブ課題D「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 牧野 淳一郎
⑤サブ課題A全体の統括および惑星集積シミュレーション	国立大学法人東京工業大学	地球生命研究所 教授 井田 茂
⑥星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーション	国立大学法人大阪大学	理学研究科 助教 富田 賢吾
⑦並列計算コード開発、サブ課題間連携推進	国立研究開発法人理化学研究所	計算科学研究センター 粒子系シミュレータ研究チーム チームリーダー 牧野 淳一郎
⑧サブ課題B全体および「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」の統括推進	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 林 祥介
⑨岩石惑星の火成活動～マントル対流系の三次元球殻モデリング統括推進	国立大学法人東京大学	総合文化研究科 准教授 小河 正基
⑩ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流までの統括推進	国立大学法人京都大学	数理解析研究所 准教授 竹広 真一
⑪サブ課題C全体の統括および太陽フレアとその地球環境影響のシミュレーションの開発	国立大学法人名古屋大学	宇宙地球環境研究所 教授 草野 完也
⑫太陽対流層の超大規模・長時間シミュレーション	国立大学法人千葉大学	理学研究院 特任助教 堀田 英之
⑬サブ課題D全体の統括および星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算の実施	国立大学法人筑波大学	計算科学研究センター センター長 梅村 雅之

⑭原始太陽系におけるダスト成長過程の研究	国立大学法人岡山大学	大学院環境生命科学研究科 環境科学専攻人間生態学講座 教授 石原 卓
⑮プロジェクトの総合的推進	国立大学法人神戸大学	理学研究科 教授 牧野 淳一郎

様式第 2 1

学会等発表実績

委託業務題目：「太陽系外惑星（第二の地球）の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明
（生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明）」

機関名： 国立大学法人神戸大学

1. 学会等における口頭・ポスター発表

発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会等名）	発表した時期	国内・外の別
The initial condition-dependence of the history of magmatism on the Moon inferred from numerical models (口頭)	小河正基	会津大学(New View of the Moon 2-Asia)	2018年4月18日	国内
Challenge of PSTEP: Project for Solar-Terrestrial Environment Prediction(口頭)	草野完也	情報通信研究機構小金井本部 (International Symposium PSTEP-3 Toward the Solar-Terrestrial Environment Prediction asScience and Social Infrastructure)	2018年5月16日	国内
分子構造探索および反応経路探索のための新手法(GLAS 法)の提唱 (口頭)	庄司光男, 常盤恭樹, 山崎笙太郎, 栢沼愛, 重田育照	岡崎カンファレンスセンター (第21回理論科学討論会)	2018年5月16日	国内
D404 RBFを用いた浅水波モデルの標準実験による検証 (口頭)	榎本剛	エポカルつくば (日本気象学会2018年度春季大会)	2018年5月19日	国内
A new approach for searching stable molecular structures by introducing repulsive interactions among walkers (ポスター)	M. Shoji, M. Kayanuma, H. Kitoh-Nishioka, Y. Shigeta	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences, Czech Republic (7th JCS symposium)	2018年5月21日	国外
Theoretical Study on the photodissociation reaction of CH3OH in astrochemical context (ポスター)	M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta	Institute of Organic Chemistry and Biochemistry of the Czech Academy of Sciences (7th JCS symposium)	2018年5月21日	国外
地球サイズの惑星の初期マントル進化における固液密度逆転の効果 (口頭)	小河正基	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月21日	国内
Effect of compressibility of turbulence in the coagulation process of the dust particles in the protoplanetary disks (口頭)	櫻井幹記, 古谷眸, 小林直樹, 岡本直也, 石原卓, 白石賢二, 梅村雅之	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月21日	国内
High-Resolution Global N-body Simulation of Planetary Formation with Fragmentation 衝突破壊プロセスを入れたN体計算における原始惑星の動径方向移動 (ポスター)	小南淳子, 台坂博, 牧野淳一郎, 藤本正樹	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月23日	国内

「粘性率の応力履歴依存を考慮した、プレート運動を伴う3次元マントル対流モデルの開発」(口頭)	宮腰 剛広、亀山 真典、小河 正基	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月23日	国内
球面螺旋節点上の浅水波モデル(口頭)	榎本剛	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月23日	国内
火星大気循環の全球・高解像度・非静力学計算に向けたモデル開発(ポスター)	櫻村 博基、八代尚、西澤 誠也、富田浩文、中島健介、石渡正樹、高橋芳幸、林祥介	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月23日	国内
太陽の対流層の底から彩層下部までの一貫した初めての計算(口頭)	堀田 英之	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月23日	国内
Magnetohydrodynamic Modeling of a Solar Eruptive Flux Tube(口頭・招待)	井上 諭	幕張メッセ (日本地球惑星科学連合2018年大会)	2018年5月24日	国内
Formation of circumstellar disks and non-ideal magnetohydrodynamic effects (口頭、招待)	Kengo Tomida	倉敷国際ホテル (12th International Conference on High Energy Density Laboratory Astrophysics)	2018年5月29日	国外
Numerical Simulation of Spacecraft Charging Processes in Time-varying Plasma Environment (口頭)	Miyake, Yohei, Kiriya, Takeshi, Katoh, Yuto, Usui, Hideyuki	The ExpoMeloneras Convention Centre, Gran Canaria, Spain (2nd URSI Atlantic Radio Science Meeting)	2018年6月1日	国外
乱流中の微細スケールにおける流体運動と慣性粒子クラスタリングの関係(口頭)	櫻井幹記, 石原卓	岡山理科大学 岡山キャンパス (平成30年度第1回日本流体力学会中四国・九州支部講演会)	2018年6月2日	国内
スーパーコンピュータを用いた乱流の大規模直接数値シミュレーションについて(口頭、招待)	石原卓	岡山理科大学 岡山キャンパス (平成30年度第1回日本流体力学会中四国・九州支部講演会)	2018年6月2日	国内
Study of the modulation of whistler-mode chorus generation by ULF waves(ポスター)	Katoh, Yuto	Hawaii Convention Centre, USA (Asia Oceania Geosciences Society (AOGS) 15th Annual Meeting)	2018年6月3日-8日	国外
乱流の計算科学(口頭)	石原 卓	ウイックあいち (第23回計算工学講演会「ポストムーブ時代」に重要となる計算技術:最新研究と将来展望)	2018年6月7日	国内
Theoretical study on the photodissociation reaction of methanol in interstellar clouds (ポスター)	M. Kayanuma, M. Shoji, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shigeta	Le Palais de l'Europe, Menton, France (16th International Congress of Quantum Chemistry)	2018年6月19日	国外
A new algorithm searching stable molecular structures and reaction pathways by introducing repulsive interactions among walkers (ポスター)	M. Shoji, M. Kayanuma, Y. Shigeta	Le Palais de l'Europe, Menton, France (16th International Congress of Quantum Chemistry)	2018年6月20日	国外
新規分子構造探索アルゴリズム(GLAS法)の提案(ポスター)	庄司光男, 常盤恭樹, 山崎笙太朗, 栢沼愛, 重田育照	朱鷺メッセ新潟コンベンションセンター (第18回日本蛋白質科学会年会)	2018年6月27日	国内

Numerical Simulation of Spacecraft Charging Processes in Time-varying Plasma Environment (口頭)	三宅洋平, 桐山武士, 加藤雄人, 臼井英之	神戸大学 (15th Spacecraft Charging Technology Conference)	2018年6月28日	国内
The critical conditions for the onset of solar flares and coronal mass ejections(口頭・招待)	Kanya Kusano	Pasadena Convention Center, CA, USA (COSPAR 2018, D2.3 Solar Transients: From Solar Origin to Earth Impact and the Outer Helioshere)	2018年7月19日	国外
カノニカル乱流の大規模直接数値シミュレーション - これまでとこれから (口頭、招待)	石原卓, 金田行雄, 森下浩二, 横川三津夫, 宇野篤也	京都大学数理解研 RIMS 共同研究 (公開型)「乱流と遷移: 構造, 多重スケール, モデル」, 京都大学 数理解析研究所 420号室,	2018年7月20日	国内
Toward the solar flare prediction based on the critical condition of MHD instability(口頭・招待)	Kanya Kusano	Chungnam National University, Republic of Korea (8th East-Asia School and Workshop on Laboratory, Space, and Astrophysical Plasmas)	2018年8月3日	国外
Numerical experiments of mantle convection of massive super-Earths: Roles of interaction between adiabatic temperature change and spatial variations in physical properties (ポスター)	Masanori Kameyama, Mayumi Yamamoto, Mifuyu Kinoshita, Saki Nakamura, Masaya Murata, and Yuya Kinoshita	海洋研究開発機構横浜研究所 (The 2nd Asia-Pacific Workshop on Lithosphere and Mantle Dynamics (AGMT2018))	2018年8月6日~8日	国内
現在と将来の太陽対流層研究に求められる数値計算コードについて(口頭・招待)	堀田 英之	神戸大学惑星科学研究センター (Formura First Workshop)	2018年8月8日	国内
Modeling for the Prediction of Solar Eruptions(口頭)	草野 完也	NCAR Mesa Lab Auditorium, Boulder, USA (HAO Summer Workshop - "Model Coupling and Data Driven Simulations of Solar Eruptions")	2018年8月17日	国外
木星型惑星の大気力学 (口頭)	竹広真一	京都テルサ (日本気象学会関西支部 第40回夏季大会)	2018年8月18日	国内
Calculation of solar convection zone with the reduced speed of sound technique(口頭・招待)	堀田 英之	Austria Center Vienna, Austria (International Astronomical Union)	2018年8月23日	国外
巨大ガス惑星に吹く風の謎 (口頭)	竹広真一	東京大学地震研究所 (第77回国立大学共同利用・共同研究拠点 知の拠点セミナー)	2018年8月24日	国内
明日の地球を守る宇宙天気予報(口頭・招待)	草野 完也	武蔵野大学(武蔵野大学「数理工学シンポジウム2018」)	2018年8月27日	国内
Slowing Down Type II Migration of Gas Giants to Match Observational Data (招待、口頭)	Ida, S.	Hotel Schloss Edesheim, Germany (4th Japanese-German meeting on Exoplanets and Planet Formation)	2018年9月1日	国外

RBF球面浅水波モデルの誤差特性に対する節点配置の影響 (口頭)	榎本剛	大阪大学豊中キャンパス (日本流体力学会年会2018)	2018年9月3日	国内
太陽の対流層の底から表面までの一貫した計算(口頭)	堀田 英之	大阪大学豊中キャンパス (日本流体力学会年会2018)	2018年9月3日	国内
乱流中の微細スケールにおける流体運動と慣性粒子クラスタリングの関係 (口頭)	櫻井幹記, 石原卓	大阪大学豊中キャンパス (日本流体力学会年会2018)	2018年9月5日	国内
Toward physics-based prediction of solar flares and coronal mass ejections: How can reconnection study improve our predictability? (口頭・招待)	Kanya Kusano	Princeton University, NJ, USA (MR2018)	2018年9月8日	国外
メタノールの光解離反応に関する理論的研究 (ポスター)	栢沼愛, 庄司光男, 相川裕理, 梅村雅之, 重田育照	福岡国際会議場 (第12回分子科学討論会)	2018年9月10日	国内
Electron hybrid simulations of the nonlinear processes of whistler-mode chorus generation in the Earth's inner magnetosphere(口頭・招待)	Katoh, Yuto	UCLA, Los Angeles, USA (The 13th International School/Symposium for Space Simulations)	2018年9月10日-14日	国外
MHD不安定性の臨界条件に基づく太陽フレア発生予測の試み(口頭)	草野 完也	兵庫県立大学(日本天文学会2018年秋季年会)	2018年9月20日	国内
黒点の拡散における太陽深部熱対流の影響(口頭)	堀田 英之	兵庫県立大学(日本天文学会2018年秋季年会)	2018年9月21日	国内
The possibility of extreme solar events based on the direct observations and the numerical simulations of flares(口頭・招待)	草野 完也	名古屋大学 (ISEE workshop on Extreme Solar Events)	2018年10月2日	国内
粒子モデル プラズマ運動論シミュレーションの高効率計算技法 (口頭)	三宅洋平	神戸大学 (第二回ポスト「京」時代の天体形成シミュレーション研究会)	2018年10月12日	国内
High Resolution Simulations of Solar Convection Zone and Dynamo(口頭・招待)	堀田 英之	金沢商工会議所 (AAPS-DPP2018)	2018年10月14日	国内
火成活動・マントル湧昇流フィードバックの二つの型(ポスター)	小河正基	旭川市科学館サイパル (日本惑星科学会秋期講演会)	2018年10月17日	国内
小質量微惑星から計算した暴走成長段階 (口頭)	小南淳子, Chris Ormel	旭川市科学館サイパル (日本惑星科学会秋季講演会)	2018年10月18日	国内
太陽地球環境予測における AI vs. 数理モデリング(口頭・招待)	草野 完也	中央大学(MIMS勉強会「AI vs. 数理モデリング」)	2018年10月20日	国内
Solar and stellar convection and dynamo(口頭・招待)	堀田 英之	土岐市産業文化振興センターセラトピア土岐(ITC27 & APPTC2018)	2018年10月21日	国内
Conical or Cylindrical differential rotation: Magnetic effect(口頭)	堀田 英之	国立天文台三鷹 (Workshop on recent topics in helio- and asteroseismology)	2018年10月24日	国内
Athena++: a New MHD Simulation Code with Adaptive Mesh Refinement (口頭、招待)	Kengo Tomida	成功大学, 台湾 (The Eighth East Asian Numerical Astrophysics Meeting)	2018年10月25日	国外
First comprehensive calculation of the whole solar convection zone(ポスター)	堀田 英之	THAGASTE, Ghent, Belgium (2018 SDO Science Workshop)	2018年10月29日	国外
A new analysis of stability of active regions for understanding and predicting the onset of solar eruptions(口頭)	Kanya Kusano	THAGASTE, Ghent, Belgium (2018 SDO Science Workshop)	2018年10月30日	国外

動径方向にルジャンドル多項式展開を用いた球殻対流スペクトルモデルの構築 (ポスター)	永井政一、石岡圭一	仙台国際センター (日本気象学会2018年度秋季大会)	2018年10月31日	国内
Direct Numerical Simulation of Compressible Turbulence with Reactions and Rapid Temperature Growth (口頭)	Ryosuke Kuno, Takashi Ishihara	仙台国際センター (15th International Conference on Flow Dynamics)	2018年11月7日-9日	国内
Relationships between Small-Scale Motions and Inertial Particle Clustering in Turbulence: Comparison between Incompressible and Compressible Turbulence (口頭)	Yoshiki Sakurai, Takashi Ishihara	仙台国際センター (15th International Conference on Flow Dynamics)	2018年11月8日	国内
The phase transition dynamics and the formation of magnetized molecular clouds in the interstellar medium (口頭)	Kazunari Iwasaki	金沢商工会議所・石川県文教会館 (2nd Asia Pacific Conference on Plasma Physics)	2018年11月13日	国内
Prediction and Science Comments based on PSTEP for NSP(口頭)	Kanya Kusano	International Space Science Institute Beijing, China (SCOSTEP Next Scientific Program (NSP) Forum)	2018年11月14日～16日	国外
スーパーコンピュータを用いた流れの数値シミュレーション (口頭、招待)	石原 卓	岡山大学 (広がる数学IX, 第28回数学キャラバン)	2018年11月23日	国内
太陽内部と表面をつなぐ 大規模シミュレーション(口頭・招待)	堀田 英之	名古屋大学(第144回地球電磁気・地球惑星圏学会講演会)	2018年11月23日-27日	国内
Cross-reference simulations by scalable communication library for the study of wave-particle interactions in magnetospheres(ポスター)	加藤 雄人	名古屋大学(第144回地球電磁気・地球惑星圏学会講演会)	2018年11月23日-27日	国内
サイクル24最大の太陽フレアに伴う宇宙環境擾乱II. 太陽磁場噴出の電磁流体力学シミュレーション(口頭)	井上 諭	名古屋大学(第144回地球電磁気・地球惑星圏学会講演会)	2018年11月27日	国内
太陽磁気フラックスロープの放出と磁気リコネクション(口頭・招待)	井上 諭	名古屋大学(宇治リコネクションワークショップ)	2018年11月28日	国内
A new approach for searching reaction pathways applicable to quantum mechanical calculations (口頭, 招待)	M. Shoji	University of Edinburgh, UK (CCS EPCC Joint Workshop)	2018年12月4日	国外
高レイノルズ数乱流の計算科学 (口頭、招待)	石原 卓	同志社大学今出川キャンパス 光塩館 地下会議室 (2018年度第2回『計算粉体力学研究会』)	2018年12月4日	国内
A Study of the Critical Condition for the Onset of Solar Flares Based on the Theory of Magnetohydrodynamic Instability(ポスター)	草野 完也	Washington D. C. USA (American Geophysical Union Fall Meeting)	2018年12月10日	国外
An Origin and Evolution of Solar Eruptive Flux Ropes(口頭)	井上 諭	Washington D. C. USA (American Geophysical Union Fall Meeting)	2018年12月10日	国外
Nonlinear processes of whistler-mode chorus generation in the Earth's inner magnetosphere(口頭・招待)	加藤 雄人	Washington D. C. USA (American Geophysical Union Fall Meeting)	2018年12月10日-14日	国外

A three-dimensional numerical model of tectonic plates that develop due to a stress-history dependent rheology(ポスター)	Masaki Ogawa, Takehiro Miyagoshi, and Masanori Kameyama	Washington D.C., USA (American Geophysical Union 2018 Fall Meeting)	2018年12月10-14日	国外
宇宙空間の有機物生成とキラリティ(口頭)	中村帆南	奈良女子大学(研究会「光・物質・生命・宇宙におけるキラリティ」)	2018年12月14日	国内
3次元磁気流体シミュレーションによる原始星フレア研究(口頭)	高棹真介	国立天文台三鷹(国立天文台天文シミュレーションプロジェクト 2018年度ユーザーズミーティング)	2019年1月15日	国内
Global Non-ideal MHD Simulations of Protoplanetary Disks with Athena++(口頭)	富田賢吾	国立天文台三鷹(国立天文台天文シミュレーションプロジェクト 2018年度ユーザーズミーティング)	2019年1月16日	国内
太陽フレア-CMEモデルの取り組みと予測への展望(口頭・招待)	井上 諭	情報通信研究機構(太陽地球環境予測のためのモデル研究の展望)	2019年1月17日	国内
MHD Simulations with Athena++: from Molecular Clouds to Protoplanetary Disks(招待、口頭)	Kengo Tomida	東京大学小柴ホール(Max Planck Princeton Center Workshop 2019)	2019年2月18日	国内
Cross-reference simulations by scalable communication library for the study of wave-particle interactions in planetary magnetospheres(ポスター)	加藤 雄人, 深沢圭一郎, 南里 豪志	東北大学青葉サイエンスホール(Symposium on Planetary Sciences 2019)	2019年2月18日	国内
An Idealized Study on Planetary-Parameter Dependence of Atmospheric General Circulation.(口頭, 招待)	Hiroki Kashimura	東北大学青葉サイエンスホール(Symposium on Planetary Sciences 2019)	2019年2月20日	国内
原始惑星系円盤乱流場中のダスト付着成長シミュレーション(口頭)	石原 卓, 小林直樹, 江野畑圭, 濱端航平, 櫻井幹記, 白石啓貴, 梅村雅之, 白石賢二	石垣島アートホテル(第35回 Grain Formation Workshop)	2019年2月18日	国内
原始惑星系円盤乱流の圧縮性とダスト粒子統計(口頭)	櫻井幹記, 小林直樹, 岡本直也, 白石賢二, 古谷眸, 梅村雅之, 石原卓	石垣島アートホテル(第35回 Grain Formation Workshop)	2019年2月18日	国内
From solar dynamo to formation of sunspot(口頭)	堀田 英之, 飯島陽久, 草野完也	東京大学(Max Planck Princeton Center Workshop 2019)	2019年2月19日	国内
Rapid acceleration of energetic electrons in the process of whistler-mode chorus generation in planetary magnetospheres(口頭)	加藤雄人	東京大学(Max Planck Princeton Center Workshop 2019)	2019年2月20日	国内
プローブ電界計測に対する衛星帯電・シース・ウェイクの影響について(口頭)	三宅洋平	名古屋大学(第11回ERGサイエンス会議)	2019年3月6日	国内
Rapid acceleration of relativistic electrons through wave-particle interactions in planetary magnetospheres(口頭・招待)	加藤雄人	富山大学(Toyama International Symposium on "Physics at the Cosmic Frontier")	2019年3月7日	国内

原始惑星系円盤の非理想MHD シミュレーション(口頭)	富田 賢吾	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
微惑星集積の大規模N 体シミュレーション(口頭)	小南 淳子	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
火星大気循環の全球非静力学モデルの開発と高解像度計算(口頭)	樫村 博基	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
ガス惑星大気非弾性モデルの開発と長時間計算(口頭)	竹広 真一	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
マントル対流、プレートテクトニクス、火成活動の三次元数値シミュレーション(口頭)	小河 正基	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
太陽地球圏環境予測に向けた計算科学の取り組み(口頭)	草野 完也	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
太陽深部磁場と黒点形成の関係(口頭)	堀田 英之	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
星間空間における有機分子の生成・分解機構に関する第一原理計算(口頭)	栢沼 愛	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
原始惑星系円盤乱流場中のダスト付着成長シミュレーション(口頭)	石原 卓	東京工業大学地球生命研究所 三島ホール (ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第3回 公開シンポジウム)	2019年3月13日	国内
黒点形成と太陽深部の磁場・熱対流構造の関係(口頭)	堀田 英之	法政大学 (日本天文学会2019年春季年会)	2019年3月16日	国内
原始惑星系円盤乱流の圧縮性がダスト粒子運動に及ぼす影響について(口頭)	櫻井幹記, 小林直樹, 白石賢二, 岡本直也, 石原卓, 古谷眸, 梅村雅之	法政大学 (日本天文学会2019年春季年会)	2019年3月16日	国内
Flux emergence simulation in a deep domain(口頭)	堀田 英之, 飯島陽久, 草野完也	東京大学 (Flux Emergence Workshop 2019)	2019年3月18日	国内
2017年9月に発生したX9.3フレアの磁気流体力学シミュレーション(口頭)	井上 諭	愛媛大学(物理談話会)	2019年3月18日	国内
Simulations of the Venus atmospheric circulation by Venus-AFES. (口頭、招待)	Hiroki Kashimura	関西セミナーハウス (RIMS Gasshuku-style Seminar: Mathematical science in numerical modeling and data assimilation of planetary atmospheres from Earth and	2019年3月18-22日	国内
Inside Athena++ (口頭)	Kengo Tomida	University of Nevada, Las Vegas, NV, USA (Athena++ Workshop 2019)	2019年3月18日	国外
3D MHD Simulations of Accreting Young Stars (口頭)	Shinsuke Takasao	University of Nevada, Las Vegas, NV, USA (Athena++ Workshop 2019)	2019年3月22日	国外

Global Non-ideal MHD Simulations of Protoplanetary Disks: Inner Dead Zone Boundaries (口頭)	Kazunari Iwasaki	University of Nevada, Las Vegas, NV, USA (Athena++ Workshop 2019)	2019年3月22日	国外
Studies of the Rossby Wave Instability Using the Athena++ Code (口頭)	Tomohiro Ono	University of Nevada, Las Vegas, NV, USA (Athena++ Workshop 2019)	2019年3月22日	国外
Glycine Formation Reactions via Non-Radical and Radical Processes in Interstellar Medium (口頭)	Mitsuo Shoji	International Centre for Interdisciplinary Science Education, Quy Nhon, Vietnam (LIFE3E' 2019: SEARCH FOR LIFE, FROM EARLY EARTH TO EXOPLANETS)	2019年3月26日	国外

2. 学会誌・雑誌等における論文掲載

掲載した論文 (発表題目)	発表者氏名	発表した場所 (学会誌・雑誌等名)	発表した時期	国内・外の別
Three-dimensional Simulation of a Magnetized Accretion Disk: Fast Funnel Accretion onto a Weakly Magnetized Star	Takasao, S., Tomida, K., Iwasaki, K., Suzuki, T. K.	The Astrophysical Journal, 857, 4	2018年4月	国外
Breaking Taylor-Proudman balance by magnetic field in stellar convection zone	H. Hotta	The Astrophysical Journal Letters, 860, L24	2018年6月	国外
A practical approach for searching stable molecular structures by introducing repulsive interactions among walkers	M. Shoji, M. Kayanuma, Y. Shigeta	Bull. Chem. Soc. Jpn. 57, 11225-11239	2018年7月	国外
Parametric Study of the Rossby Wave Instability in a Two-dimensional Barotropic Disk. II. Nonlinear Calculations	Ono, T., Muto, T., Tomida, K., Zhu, Z.	The Astrophysical Journal, 864, 70	2018年8月	国外
Trapping Low-mass Planets at the Inner Edge of the Protostellar Disk	Brasser, R., Matsumura, S., Muto, T. Ida, S	Astrophysical Journal Letters 864, id. L8(6 pp)	2018年8月	国外
Slowing Down Type II Migration of Gas Giants to Match Observational Data	Ida, S., Tanaka, H., Johansen, A., Kanagawa, K. D., Tanigawa, T	Astrophysical Journal 864, id. 77(10 pp). 10.3847/1538-4357/aad69c	2018年8月	国外
A Study of Magnetic Field Characteristics of the Flaring Active Region Based on Nonlinear Force-free Field Extrapolation	J. Muhamad, K. Kusano, S. Inoue, Y. Bamba	The Astrophysical Journal, 863, 162	2018年8月	国外
Relationships between Small-scale Fluid Motions and Inertial Particle Clustering in Turbulence	Y. Sakurai and T. Ishihara	J. Phys. Soc. Japan, 87, 093401	2018年8月	国外
The curious case of Mars' formation	Woo, J. M. Y., Brasser, R., Matsumura, S., Mojzsis, S. J., Ida, S	Astronomy & Astrophysics 617, id. A17(13 pp). 10.1051/0004-6361/201833148	2018年9月	国外

RBF球面浅水波モデルの誤差特性に対する節点配置の影響	榎本剛	日本流体力学会 年会2018講演 論文集, ISSN2433-2666, 4pp. 査読なし	2018年9月	国内
Revisiting the pre-main-sequence evolution of stars. II. Consequences of planet formation on stellar surface composition	Kunitomo, M., Guillot, T., Ida, S., Takeuchi, T	Astronomy & Astrophysics 618, id.A132(18 pp). 10.1051/0004-6361/201833127	2018年10月	国外
Magmatic differentiation and convective stirring of the mantle in early planets: the effects of the magmatism-mantle upwelling feedback	Ogawa, M.	Geophys. J. Int., 215, 2144-2155	2018年10月	国外
Magnetohydrodynamic Modeling of a Solar Eruption Associated with an X9.3 Flare Observed in the Active Region 12673	S. Inoue, D. Shiota, Y. Bamba, S. H. Park	The Astrophysical Journal, 867, 83	2018年11月	国外
Onset mechanism of solar Eruptions	S. Inoue, Y. Bamba, K. Kusano	Journal of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics, 180, p. 3-8	2018年11月	国外
Effects of adiabatic compression on thermal convection in super-Earths of various sizes	Miyagoshi, T., Kameyama, M., Ogawa, M	Earth Planet. Space, 70, 200	2018年12月	国外
一番星へ行こう!日本の金星探査機の挑戦 その36 ~AFES-Venusによる数値計算とデータ同化	檜村 博基, 杉本 憲彦, 高木 征 弘, 安藤 紘基, 今村 剛, 松田 佳 久, 榎本 剛, 大 淵 済, はしもと じょーじ, 石渡 正樹, 中島 健介, 高橋 芳幸, 林 祥 介	日本惑星科学会「遊・星・ 人」第27巻4号	2018年12月	国内
Orbital evolution of Saturn's mid-sized moons and the tidal heating of Enceladus	Nakajima, A., Ida, S., Kimura, J., Brassier, R	Icarus 317, 570-582. 10.1016/j.icarus.2018.08.03 0	2019年1月	国外
Planetary-scale streak structure reproduced in high-resolution simulations of the Venus atmosphere with a low-stability layer	H. Kashimura, N. Sugimoto, M. Takagi, Y. Matsuda, W. Ohfuchi, T. Enomoto, K. Nakajima, M. Ishiwatari, T. M. Sato, G. L. Hashimoto, T. Sato, Y. O. Takahashi, Y. -Y. Hayashi	Nature Communications, 10, 23	2019年1月	国外
Weak influence of near-surface layer on solar deep convection zone revealed by comprehensive simulation from base to surface	H. Hotta. H. Iijima, K. Kusano	Science Advances, 5, eaau2307	2019年1月	国外

Theoretical of the photodissociation reaction of methanol	M. Kayanuma, M. Shoji, K. Furuya, Y. Aikawa, M. Umemura, Y. Shiget	Chem. Phys. Lett., 714, 137-142	2019年1月	国外
The Early Stage of Molecular Cloud Formation by Compression of Two-phase Atomic Gases	Iwasaki, K., Tomida, K., Inoue, T., Inutsuka, S.-i.,	The Astrophysical Journal, 873, 6	2019年3月	国外

「太陽系外惑星(第二の地球)の誕生と太陽系内惑星環境変動の解明
(生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明)」
実施計画

令和元年5月31日
国立大学法人神戸大学
理学研究科 教授 牧野 淳一郎

更新履歴

第1版 平成28年11月30日

第2版 平成28年12月16日

「目標・期待される成果」について加筆

第3版 平成29年5月29日

必要計算資源量の記載を修正

第4版 平成29年12月22日

中間評価結果を踏まえて内容を更新（「4. 中間評価における指摘事項への対応状況」を加筆）

必要計算資源量の記載を修正

第4a版 平成30年1月22日

第4版における更新・加筆箇所を赤字で記載

第5版 平成30年2月2日

平成30年度の「京」の計算資源量の記載を修正（P. 10）

サブ課題Dの分担機関に岡山大学を追加（P. 10、19、21）

第5版における更新・加筆箇所は青字で記載

第6版 平成30年3月26日

別紙の平成30年度の所要経費を修正し青字で記載

第7版 令和元年5月31日

平成31年度の「京」、「京」以外の計算資源量を更新し緑字で記載（P. 10）

別紙の平成31年度の所要経費、計算資源量を更新し緑字で記載

目次

1. 実施概要	1
(1) 目的・意義	1
(2) 研究開発内容	1
(3) 目標・期待される成果	2
(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ	3
(5) 年次計画	5
(6) 実施体制	10
(7) 必要計算資源	10
2. 研究開発内容詳細	11
2-1. サブ課題A. 「惑星の起源の解明」	11
(1) 目的・意義	11
(2) 実施内容	11
(3) 目標・期待される成果	11
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	12
(5) 実施体制	13
2-2. サブ課題B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」	13
(1) 目的・意義	13
(2) 実施内容	13
(3) 目標・期待される成果	14
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	15
(5) 実施体制	16
2-3. サブ課題C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」	16
(1) 目的・意義	16
(2) 実施内容	17
(3) 目標・期待される成果	17
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	18
(5) 実施体制	18
2-4. サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」	19
(1) 目的・意義	19
(2) 実施内容	19
(3) 目標・期待される成果	19
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと	20
(5) 実施体制	20
3. 採択時の留意事項への対応状況	22
3-1. ポスト京利用に向けて、計算の大規模化等の利用準備の具体的なシナリオを明確にすること	22

3-2. 必要に応じて、計算機、アプリケーションの専門家の参画を検討すること	23
3-3. 重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」との役割分担を明確にすること	23
4. 中間評価における指摘事項への対応状況	24
4-1. 目標の明確化について	24
4-2. 成果発表について	27
4-3. ポスト「京」での具体的な目標について	28
4-4. サブ課題間の連携等について	31

1. 実施概要

地球がどのように生まれ、どのようにして生命を育む惑星に進化したか、さらには現在及び将来の地球・太陽・太陽系の進化が人類社会にどのような影響を及ぼしうるかを解明するため、惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野のシミュレーション研究者が結集し、太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。

(1) 目的・意義

計算機の性能向上を生かし、惑星科学研究ではまだ部分的なものにとどまっている大規模シミュレーションによる理解を推進し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。

本提案は、ポスト「京」の計算能力を生かした大規模シミュレーションと、近年急速に発展した星形成過程、惑星形成過程、系外惑星の観測、また太陽系内探査の成果を統合することで、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明することを目標とするものである。星形成・惑星形成過程の研究は我が国が大きな貢献をしている ALMA 望遠鏡の重要目標であり、系外惑星研究もすばる望遠鏡他国内・国外の観測施設で多くの研究者が取り組んでいる。さらに太陽系内探査は JAXA において「あかつき」・「はやぶさ 2」を始めとして多くの計画が実行中・準備中である。これらの観測や探査から得られる詳細なデータは、しかし、多くの場合進化のプロセスの一瞬を切り出したものであり、進化プロセスの全貌を理解することは理論やシミュレーションによって観測・探査の結果を再現することで初めて可能になる。また、観測や探査の結果は詳細かつ複雑なものとなっており、大規模・高精度な数値シミュレーションによって初めてその理解が可能になる。本提案は、このように、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携し、宇宙科学・惑星科学の重要課題の解決に貢献することで、我が国の科学的課題の解決に貢献し、国際的地位の向上に貢献する。

また、本提案は単に既存・進行中の探査計画と連携するだけでなく、将来の我が国の惑星探査計画が依って立つ土台となるという点で国家的見地から意義の高いものである。従来の惑星探査は欧米の主導のもとに行われてきた。このような状況を打開し、科学的価値の高い惑星探査を行うためには、惑星内部進化に対する独自の統一的視点を確立することが必須である。本提案はそのような独創的な視点を確立するためのものである。

太陽周期活動とその変動機構はガリレオ以来の近代天文学の歴史的課題である。太陽対流層の複雑な乱流を再現することがこれまで困難であったため、その謎を解くことができなかった。しかし、「京」を駆使した我々の研究 (Hotta et al. 2016, Science 参照) によって、ポスト「京」の計算能力を駆使すれば、この歴史的難問を初めて解くことが可能であることが強く示されている。さらに、太陽活動は地球環境変動や様々な社会インフラに大きな影響を与えることが指摘されており、その活動を予測することは科学的理解のみならず社会と経済に大きな貢献をするものである。

(2) 研究開発内容

惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野のシミュレーション研究者が結集し、惑星系の起源、

惑星の構造、大気や表面の水圏の進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象の大規模数値シミュレーションによる研究を可能にする計算アルゴリズム・計算コードを開発する。開発した計算コードを使い、ポスト「京」による大規模シミュレーションを実施し、惑星の起源・進化と惑星環境変動を解明する。

(3) 目標・期待される成果

目標：

星形成・原始惑星系円盤形成から微惑星、原始惑星、最終的な惑星形成にいたるまでの過程を融合した大規模計算を行い、太陽系の探査や系外惑星、星周円盤の観測データと比較することで、惑星の形成過程を明らかにする。様々なサイズの地球型惑星の内部進化と表層進化を統一的に理解する事を最終目的とし、地球型惑星の気候、内部進化、ガス惑星の内部進化を明らかにする。太陽磁場の起源である太陽対流圏の第一原理的シミュレーションにより黒点、太陽活動の長期変動の起源を明らかにし、さらに磁場からの太陽フレア、太陽風、その惑星間空間での伝搬、地球磁気圏との相互作用までを多階層シミュレーションにより統一的に明らかにする。惑星間ダスト上の分子生成の量子化学計算により、太陽系における物質進化を探求する。

アウトプット成果

・平成 29 年度終了時：

大域的な惑星形成計算を現在の 2 桁上の 1 億粒子で実現する。火成活動、ガス惑星、惑星大気の高解像計算を試行、実現する。太陽対流層・表面連結計算を実行し、大規模黒点の出現の再現、フレア再現シミュレーションの初期データとなるデータベースを構築する。氷ダスト上の網羅的解析を行い、ダスト表面反応の影響、温度などの環境効果、紫外線や宇宙線などの強い外場の影響の解明、また、原始惑星系円盤乱流中のダストの成長過程を非圧縮流体計算により探求する。

・本格実施フェーズ終了時：

現在の 3 桁上の 10 億粒子での惑星形成の多体計算を実現し、星間ダストから惑星までの集積過程を統一的に計算可能にする。火星大気全球高解像度計算、月の熱史・火成活動史の計算、ガス惑星の高分解能の計算を可能にする。太陽対流圏の磁場形成過程を再現すると共に、太陽フレアの発生条件となる磁場構造を明らかにし、地球磁気圏環境の変動のシミュレーションを可能にする。励起状態量子化学計算の大規模並列化・チューニングを行い、ポスト京での大規模計算を可能にする。

・ポスト「京」運用開始 5 年後：

1-10 億粒子規模の惑星形成の数値シミュレーションを多数実行し、惑星形成モデルを構築し、観測されている系外惑星系の多様性の起源を明らかにする。大規模計算から火星の全球ダストストーム発生の謎に迫り、月の熱史・火成活動史への予言、ガス惑星の帯状流形成モデルの提案を行う。太陽表面を含んだ太陽対流層の計算を行い、黒点の自発的生成過程を明らかにする。磁気嵐における人工衛星の帯電過程を衛星の形状や表面素材の影響を正確に取り入れて再現する。原始太陽系における有機分子生成の第一原理計算を世界に先駆けて実現する。

アウトカム成果

・ポスト「京」運用開始5年後：

円盤と系外惑星の観測データを整合的に説明する一般的惑星形成モデルを完成させる。月の熱史・火成活動史を予言し、更なる探査計画を提案する。ガス惑星の深部循環と表層循環とを統合した帯状流形成モデルの可能性を提案する。小規模対流、ダストデビルから大循環に至る火星大気運動を表現し、全球ダストストーム発生之谜に迫る。黒点の起源に迫り、太陽周期に関する知見を得る。観測データに基づくフレアの再現を行い、その発生予測に貢献する。磁気嵐における衛星帯電の原因を明らかにする。宇宙における分子進化予測手法を確立し、また、原始太陽系におけるダスト成長と有機分子生成過程の関係を明らかにする。

・ポスト「京」運用開始10年後：

地上超大型望遠鏡による、系外惑星系のハビタブル・ゾーンに存在する地球型惑星の大気観測や生命存在を示すバイオマーカー観測の議論に繋げる。地球型惑星の進化計算やガス惑星の構造進化計算に迫る。地球型惑星大気の大気対流と大循環の多様性に迫る高解像度計算を実現する。太陽活動の予測可能性を高める。太陽フレアの発生とその影響としての衛星帯電を動的に予測する。今後 ALMA 望遠鏡等により直接検出される可能性のある、系外惑星系の有機分子生成過程・太陽系以外での生命の発生の可能性を探究する。

(4) 周辺領域への波及効果、課題全体における計算科学やシミュレーションの位置づけ

惑星科学、特に観測は飛躍的に進歩した。観測からの膨大なデータを整合的に解釈・理解するためには、第一原理からの信頼できる理論シミュレーションが必須となっている。一方、従来の惑星形成過程・星形成過程のシミュレーションは、あるシナリオからその一部を切り出すもので、現実の惑星の多様性を理解するには不足だった。ポスト「京」が可能にする大規模計算は、特定のシナリオによらない惑星形成・進化シミュレーションを実現し、観測の理解に大きく貢献する。また、惑星大気への理解にも大きく貢献する。太陽活動の理解については、「京」を使って太陽の対流圏の全球高解像度計算に世界に先駆けて成功し、国際的にも注目される成果をあげている。是非ともこの成果を発展させ、観測プロジェクトと連携し、太陽活動の変動の理解につなげていく必要がある。アストロバイオロジーに対して、理論的理解の枠組みを与えるため、本課題では、ダストの表面上での有機分子反応の第一原理計算から、有機分子の起源に迫る。

世界を先導する科学的ブレークスルーとして期待できる成果には、以下があげられる。

- 世界に先駆けて星形成から惑星形成にいたる過程の、シミュレーションにベースをおいた、確実な理解を構築することで、観測・探査の結果と合わせ、惑星の起源・多様性の統一的な理解につながる
- 地球を含む惑星の形成後の内部構造の進化を大規模な3次元計算に基づいて初めて明らかにすることで、惑星進化の一般理論を構築する。さらに、大気の大気構造・運動についても明らかにする
- 世界に先駆けて太陽活動の、黒点の11年周期の変動を含む長期変動のメカニズムを解明し、さ

らに太陽フレアの発生メカニズムを解明し、その地球までの伝搬のシミュレーションを行う

- 原始惑星円盤内のダスト上での物質の化学進化を大規模な量子化学計算に基づいて初めて明らかにし、生命の起源を含む有機分子の形成過程を解明する

科学的ブレークスルーを生み出す上で、観測研究者との連携が重要になる。本課題を通じて、サブ課題ごとに以下のような連携体制構築を計画している。

- サブ課題Aにおいては、系外惑星探査の様々なプロジェクトと共同していく。サブ課題Aの拠点である東工大 ELSI はそのような連携のハブとなっており、そのネットワークを通して連携していく。
- サブ課題Bにおいては、JAXA の探査プロジェクトとの連携を進めていく。サブ課題Bの拠点である 神戸大 CPS は JAXA との連携協定のもと惑星探査について密接な協力関係にあり、それを通じた連携を進める。
- サブ課題Cにおいては、最高精度で太陽表面を観測できる「ひので」衛星、打ち上げが予定されている地球放射線帯を最も精密に測定する ERG 衛星などの精密データに基づくデータ駆動型シミュレーションを、ポスト「京」を利用することにより初めて実現し、太陽活動の影響予測を実現する。
- サブ課題D においては、「はやぶさ2」「たんぼぼ計画」等と連携していく。
- また、課題全体としては、理研 AICS のフラッグシップ 2020 プロジェクト及び研究部門と密接な連携をとり、アプリケーションの開発を推測していく。

各サブ課題において、「京」の能力を大幅に超える計算能力を必要としている。サブ課題Aにおいては、「京」で可能になった数十万粒子から自由度を3桁以上飛躍的に引き上げることを計画しており、これはアルゴリズムの改善とポスト「京」の計算能力をあわせて初めて可能になる。サブ課題Bでは、理研 AICS で開発されている気候シミュレーションコード NICAM を利用し、高い効率での大規模計算を実現する。サブ課題Cでは、亜音速流に対して従来使われてきた非圧縮近似ではなく、音速抑制法による陽解法を実現したことで、「京」で従来の最大規模の計算を格子点数で2桁以上上回り、実行効率でも24%と高い効率を実現した。ポスト「京」でもさらにアルゴリズムの改良を進め、高い効率を実現する。サブ課題Dでも、同様に計算も効率化をはかる。

(5) 年次計画

課題全体	中間目標 (平成29年度)	本課題に関するアプリケーション開発・研究について、開発計画 (研究開発内容、目標・期待される成果、実施体制、必要計算資源、工程表、所要経費等) の詳細の策定を再委託先の各サブ課題代表機関・分担機関と共同で行う。また、策定した開発計画の実現可能性を調査するとともに、実施体制構築の着手・研究等を進める。課題全体の連携を密にし、これによってサイエンスと問題解決の手法の両面で相互に協力しながら研究を推進する。理研 AICS とも連携し、ポスト「京」向けのアプリケーションの開発・最適化を行う。
	最終目標 (平成31年度)	調査研究・準備研究フェーズで策定した研究開発計画に基づいて、惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野において大規模数値シミュレーションによる研究を可能にする計算アルゴリズム・計算コードを開発する。開発した計算コードを使い、ポスト「京」による大規模シミュレーションを実施し、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明へ向けた研究を行う。プロジェクトで得られた成果については積極的に公表し、今後の展開に資する。

サブ課題名 (分担機関・責任者)	調査研究・準備研究フェーズ		本格実施フェーズ	
	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
サブ課題A 惑星の起源の解明 (東京工業大学・井田茂)	<p>(目標) 観測データを精査しながら、星・惑星形成過程の現状を理解し、研究計画策定する</p> <p>(実施内容) 研究体制構築をすすめ、京での成果を踏まえ、ポスト「京」で目指す、具体的科学目標を設定する。</p>	<p>(目標) 星・惑星形成の高速シミュレーションコードを開発し、最適化を進める。</p> <p>(実施内容) 重力N体計算コード、非理想磁気流体コードの開発を進める。また、「京」を用いて、コードの最適化を進める。</p>	<p>(目標) 高精度の星形成シミュレーションと大粒子数の惑星形成シミュレーションコードを実施する。</p> <p>(実施内容) 大域的重力N体シミュレーションおよび非理想磁気流体シミュレーションを実行する。また、観測データとの比較検討を始める。</p>	<p>(目標) 星形成過程と同時進行させながら、星間ダストから惑星までの集積過程を统一的に計算し、観測されている系外惑星系の多様性の起源を明らかにする。</p> <p>(実施内容) 大域的重力N体シミュレーションおよび非理想磁気流体シミュレーションを実行する。また、観測データとの比較検討を進行する。</p>

<p>サブ課題B 惑星内部・表層のダイナミクスと進化（神戸大学・林祥介）</p>	<p>(目標) 球殻領域での高分解能大規模流体計算の可能性を検討し、岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデルの実装計画を策定し、「京」上での試験計算を実現する。</p> <p>(実施内容) マントルモデルおよび大気モデル改良開発と必要となる基礎ルーチンの開発。実装実験に検証と最適化検討。</p>	<p>(目標) 岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデルについて、それぞれ必要となる基礎ルーチンの開発ならびに「京」上での大規模計算の実装実験を実施する。</p> <p>(実施内容) マントル対流モデルへの火成活動の導入。大気大循環モデルにおける現実火星状態の再現性検証。球面調和関数ルーチンの最適化。</p>	<p>(目標) 岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデルについて、それぞれの科学的目標を狙える計算の実現を目指す。</p> <p>(実施内容) マントルおよび大気に関する高解像度実験の実現。月のマントル進化モデルの確立。火星全球ダストストーム発生条件の理解。</p>	<p>(目標) 岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデルについて、それぞれの大規模高解像度計算を実現し、科学的成果を獲得する。</p> <p>(実施内容) 月形成過程への制約の解明。木星型惑星表層縞状ジェット流の成因を解明。より広い惑星パラメーターへの計算対象拡張。</p>
--	---	--	--	--

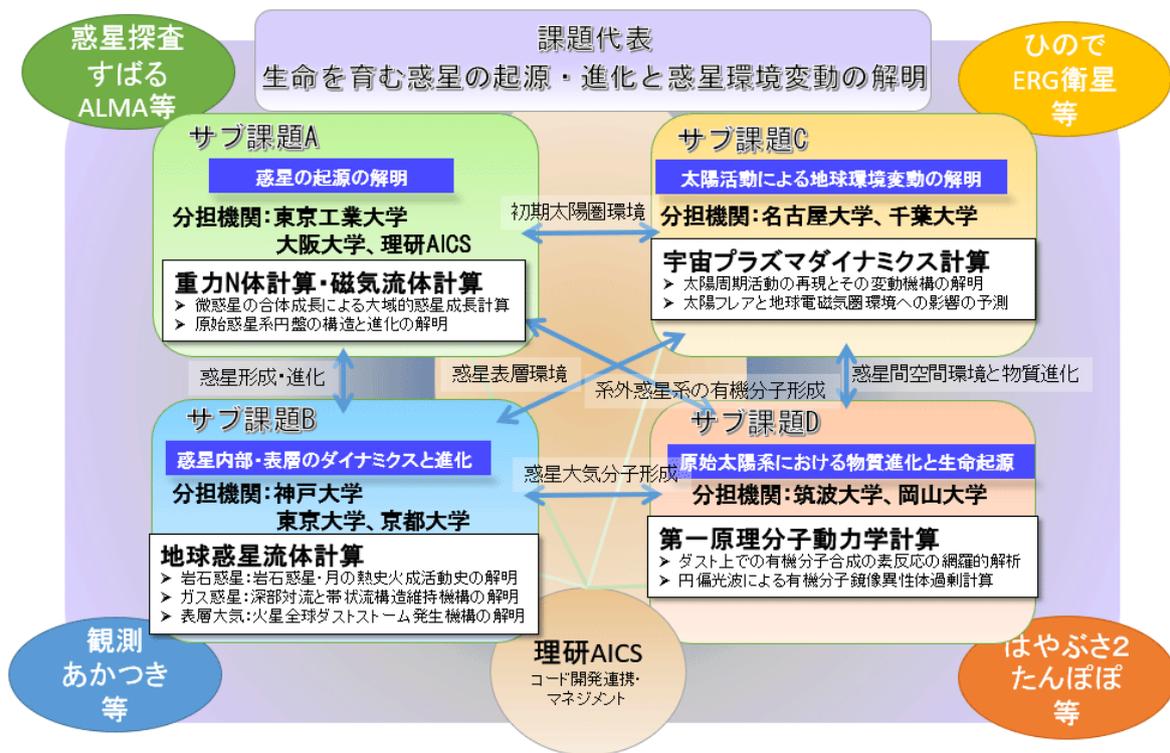
<p>サブ課題C 太陽活動による地球環境変動の解明 (名古屋大学・草野完也)</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境モデルの開発と初期データ整備</p> <p>(実施内容) 「京」を使って太陽対流層モデルの計算を行うと共に、フレアモデル・磁気圏モデル・衛星環境モデルの開発を行い、初期データを整備する。</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境モデルの初期実験</p> <p>(実施内容) 「京」を使って太陽対流層モデルの計算を継続すると共に、太陽周期変動の機構を探ると共に、フレア・磁気圏・衛星環境の初期実験を実施する。</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境モデルの計算とポスト「京」モデル開発</p> <p>(実施内容) 太陽黒点形成の実験コードを開発すると共に、フレア再現・超高精度磁気圏モデル実験・衛星環境モデルの計算を行う。</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境ポスト「京」モデルによる予測可能性の検討</p> <p>(実施内容) 太陽黒点形成の実験を行うと共に、フレア再現・超高精度磁気圏モデル実験・衛星環境モデルの計算結果の解析を行い、目的を達成する。</p>
--	--	--	--	--

<p>サブ課題D 原始太陽系における物質進化と生命起源の探究 (筑波大学・梅村雅之)</p>	<p>(目標) 量子力学・分子力学混合法 (QM/MM法) および励起状態分子動力学計算 (Surface Hopping) 法コードをメニーコア・アーキテクチャに最適化する。</p> <p>(実施内容) 「京」とCOMAを用いた計算に基づき、大規模な第一原理分子動力学計算に向けた研究計画を策定し、実施体制を構築する。</p>	<p>(目標) ダスト形成過程の計算を実行し、ダスト上の有機分子合成の解析により、星間空間での反応過程を理論的に明らかにし、反応ネットワークを構築する。</p> <p>(実施内容) 「京」とCOMAを用いて、基底状態量子化学計算により、ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析を行う。</p>	<p>(目標) アミノ酸および考え得るアミノ酸前駆体に関して、円二色性の量子力学計算を行い、鏡像異性体過剰を引き起こす反応経路を明らかにする。</p> <p>(実施内容) ポストT2Kを用いて、円偏光波による有機分子鏡像異性体過剰の大規模な第一原理分子動力学計算を行う。</p>	<p>(目標) ダスト形成過程の大規模計算を実行し、ダスト成長過程と有機分子形成過程ならびに鏡像異性体過剰の反応経路を整合的に明らかにする。</p> <p>(実施内容) ポストT2Kを用いた計算をまとめ、これに基づき、ポスト「京」での大規模な第一原理分子動力学計算の計画を策定する。</p>
--	--	--	---	---

(6) 実施体制

本提案は、サブ課題A-Dからなる。これらがサイエンスと問題解決の手法の両面で相互に協力しながら研究を進めていく。このため、課題全体の定期的な会合、研究連絡会等を設け、密に連携していく。また、AICS とも連携し、ポスト「京」 向けのアプリケーションの開発・最適化を進めていく。

サブ課題Aでは、星形成計算から原始惑星系円盤までを阪大、原始惑星系円盤からの惑星形成を東工大が担当し、東工大 ELSI を中心に系外惑星の観測プロジェクトと連携していく。サブ課題Bでは地球型惑星気候を神戸大、ガス惑星を京大、固体惑星進化を東大が担当、神戸大 CPS を中心にあかつき等観測プロジェクトと連携する。サブ課題Cでは太陽対流層の計算を千葉大、表層・フレアを名大が担当し、ひので等観測プロジェクトと連携する。サブ課題Dは星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算を筑波大、乱流中のダスト成長過程を岡山大が担当し、「はやぶさ2」等と連携する。



(7) 必要計算資源

「京」の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度
4, 323, 188	3, 027, 150	3, 632, 580	1, 426, 874

「京」以外の計算資源量

(単位：ノード時間/年)

H28 年度	H29 年度	H30 年度	H31 年度
580, 000	1, 630, 000	4, 340, 960	1, 282, 104

2. 研究開発内容詳細

2-1. サブ課題A. 「惑星の起源の解明」

(1) 目的・意義

1995年以來の系外惑星の観測の急速な進展により、太陽系外の惑星系は多様な姿をしていることがわかり、ケプラー宇宙望遠鏡などによる近年の観測結果は、太陽型星の半数には、星近傍に地球型惑星が存在していることを示している。惑星系の多様性は、初期状態である原始惑星系円盤の力学的・熱的構造に多様性があり、円盤との重力相互作用による惑星軌道移動など、大域的な過程が惑星形成において重要な役割をはたしていることを示す。また、地球型惑星の遍在性から、惑星表面に海が存在し得る軌道範囲（ハビタブル・ゾーン）に地球質量程度の惑星「第二の地球」が多数存在することは確実である。今後「第二の地球」の観測が進むことは確実で、2020年代中盤完成予定の地上超大型望遠鏡 TMT、E-ELT は「第二の地球」の大気観測を行う予定で、生命存在を示すバイオマーカーの観測も期待されている。

本研究では、力学、輻射輸送、磁気流体を組み合わせて、原始惑星系円盤の構造と進化およびそこでの惑星形成の大域的な大規模シミュレーションのコード開発と実行を行い、一般的な惑星系の統一的な形成理論を構築し、「第二の地球」がどのような確率で存在し、またその惑星にどのような多様性が存在するのかを予測することを目的とする。

(2) 実施内容

東京工業大学では、微惑星の衝突合体による惑星形成の1億以上の粒子を用いた大域的N体シミュレーションの開発・最適化を理研 AICS と共同で行い、多数のシミュレーションを実行する。単なる粒子の合体成長だけではなく、円盤ガスの惑星への集積による木星型惑星の形成や、円盤との重力相互作用による惑星軌道移動をモデル化して入れる。木星型惑星の重力は惑星系全体に及び、軌道移動は十分に速いので、惑星系全体を計算領域とした大域的計算を行う。円盤条件が異なれば、惑星材料物質も異なり、形成される惑星の配置が変わる。特に微惑星集積で形成される固体惑星がある閾値を越えると、大量のガスが流入して、質量が数十倍の木星型惑星が形成され、惑星系の姿が大きく変わる。さらに、惑星軌道移動は円盤の熱的・力学的状態に大きく左右される。

大阪大学では、非理想 MHD 効果や円盤ガスの電離度の進化まで考慮した、円盤の大域的高解像度シミュレーションのコード開発を行い、多数のシミュレーションを行うことで、円盤の初期パラメータと時間進化を制約して東京工業大学の計算と連携する。

さらに東京工業大学では、衝突での破片生成を入れたN体シミュレーションを行なう。ダスト生成は円盤ガスの電離度を変え、円盤の構造や進化に影響する。大阪大学と連携して、統合的な惑星形成と円盤進化のモデルを構築する。

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果

・平成29年度終了時：

構築された原始惑星系円盤モデルを使って、本格的な稼働を始めたチリの大型電波干渉計 ALMA による円盤観測データを解釈する。大域的な惑星形成計算を現在の2桁上の1億粒子で実現する。

・ **本格実施フェーズ終了時：**

構築された原始惑星系円盤モデルを使って、大型電波干渉計 ALMA による円盤観測データを使って円盤モデルを較正し、この円盤モデルのあり得るパラメーター範囲のもとに、大域的な惑星形成計算を現在の 3 桁上の 10 億粒子で実現する。

・ **ポスト「京」運用開始 5 年後：**

観測と統合的な、星間雲からの原始惑星系円盤の形成進化の一般的モデルを構築する。大域的な惑星形成計算を多数実行し、一般的な惑星形成モデルを構築し、観測されている系外惑星系の多様性の起源を明らかにする。

アウトカム成果

・ **ポスト「京」運用開始 5 年後：**

進展が続く系外惑星の観測データのもとに惑星形成モデルを較正し、円盤モデルへのフィードバックをかけながら、円盤と系外惑星の観測データを統合的に説明する一般的惑星形成モデルを完成させる。

・ **ポスト「京」運用開始 10 年後：**

2020 年代中盤完成予定の地上超大型望遠鏡 TMT、E-ELT による、系外惑星系のハビタブル・ゾーンに存在する地球型惑星の大気観測や生命存在を示すバイオマーカーの観測の議論へつなげる。

(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければできないこと

「京」では、惑星形成多体計算向けコード Kninja を開発し、世界初の 1000 ノードを超える惑星形成多体計算に成功、30 万粒子程度までの計算を可能にし、前例のなかった大域計算を行うことができた。ポスト「京」では、アルゴリズムの改良も行うことでこの 1000 倍程度、数億粒子の計算での大域惑星形成過程を世界で初めて明らかにする。星形成の計算コードは「京」での大規模利用の実績はまだないが、天文台の Cray XC30 等の大規模並列計算機でよいスケーラビリティを示す Athena++ コードを米国と共同で課題実施者が開発しており、ポスト「京」での 10 億格子点・1 億時間ステップ程度の計算を行う計画である。これは 1 モデルで「京」で 1 週間程度の計算となり、多数行うことは「京」では不可能だが、ポスト「京」では現時点的な資源量で実行可能である。これにより、原始惑星円盤の構造と進化を明らかにする。

(5) 実施体制

星形成過程と同時進行させながら、星間ダストから惑星までの集積過程を統一的に計算可能にすることがサブ課題Aの目標である。星形成計算から原始惑星系円盤までの部分のシミュレーションは阪大を中心に推進し、原始惑星系円盤内での惑星形成のシミュレーションは東工大を中心に推進する。相互に原始惑星系円盤を接点として情報交換を行い、統一的なモデルを構築する。コード開発においては、理研 AICS と共同する。統一モデルを使って、東工大 ELSI を中心にして、ALMA による原始惑星系円盤の観測やすばるによる系外惑星の観測プロジェクトと連携していく。



2-2. サブ課題B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

(1) 目的・意義

太陽系探査の蓄積、惑星形成論の進展、物質科学・地質学的知見の集積により、地球・月・惑星等の形成進化の解明が期待され、一方、天文学的観測の発展が実現した数多の太陽系外惑星の発見は惑星の可能な多様性の掌握を要請しつつある。これらの期待や要請に、連続体力学に基づく数値シミュレーションを対峙させることは科学的課題として重要であると同時に、探査と天文観測の企画立案において不可欠であり、それを担える体制の構築と人材の育成は我が国では喫緊の課題である。

本サブ課題では、惑星内部と表層の力学シミュレーションの実現を目指し、そこで必須である超高速大規模計算機の活用を試行する。球面・球殻での地球惑星流体計算をキーに技術連携可能な研究者を分野横断的に組織し、宇宙地球科学で専門分化した知見の再結集を要する惑星進化・多様性シミュレーション分野を確立し、探査・観測の基盤となすことを目指す。

(2) 実施内容

(i) 岩石惑星として地球型（岩石）惑星の火成活動・マントル対流系の三次元球殻モデル、(ii) ガス惑星として木星型（ガス）惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで、(iii) 惑星大気として地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストームをテーマに選び、数値的表現能力を探索しその理解を得ることを通じて、超高速大規模計算の可能性を探索。

(i) 岩石惑星：

マグマの生成移動モデルを開発しマントル対流モデル ACuTEMan に実装する。Yin-Yang 分割を適用して高効率の球殻領域計算を実現する。矩形領域でマグマモデル化を検証した後、球殻領域で月の

マントル進化計算を行う。さらに、リソスフェア破壊・プレート境界生成モデルを開発導入して、火星やプレートテクトニクスが生じている地球等に適用する。

(ii) ガス惑星：

超高次球面調和関数変換のための新たな計算スキームを開発、並列化効率向上の可能性を追及・実証する。これを汎用化し SPMODEL に実装、全球超高分解能回転球殻熱対流モデルを構築、ガス惑星の深層・表層同時計算を実現して、縞状風構造の解明を目指す。

(iii) 惑星大気：

「京」で経験を積み重ねてきた二十面体非静力学大気力学コア (SCALE 力学コア) を基に、別途構築してきた火星大気物理過程を導入することにより、高い並列化効率が期待できる非静力学全球火星大気モデルを構築し、熱対流とそれに伴う渦生成を陽に表現する全球高解像度計算を実現する。

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果

・平成 29 年度終了時：

(i) 岩石惑星：

火成活動のモデル化の完成、マントル対流計算モデルの 3 次元化とそこへの火成活動モデルの実装、これを用いた高解像計算の試行。

(ii) ガス惑星：

球面調和関数変換ルーチンの開発と高解像度化にともなう性能試験の実施、その球殻対流モデルへの実装と高解像計算の試行。

(iii) 惑星大気：

SCALE-GM での表面重力、大気圧等の火星化を、「京」での試行計算を実施し、順次実現、必要な改良を施し、火星環境を念頭においた流体環境での力学的な高解像度計算を実現。

・本格実施フェーズ終了時：

(i) 岩石惑星：

動径方向 120 層の高解像度計算で、火成活動を陽にとりこんだ月の 3 次元球殻領域マントル対流計算を行う。

(ii) ガス惑星：

全球超高分解像度球殻計算を実現し、ガス惑星全体を水平解像度 0.2 度、鉛直 128 層で表現する全球計算を行なう。

(iii) 惑星大気：

火星の放射、ダスト循環を設計導入し火星大気化を完了する。全球を水平解像度 800m、鉛直 200 層で表現する全球計算を行う。

・ポスト「京」運用開始 5 年後：

(i) 岩石惑星：

火星活動を陽に取り込んだ 3 次元球殻領域マントル対流計算モデルの 45 億年間 (月の全歴史) 積分

を実現、さらに、惑星サイズを変えるパラメーター計算を実現する。

(ii) ガス惑星：

10 万惑星日以上の高解像度全球ガス惑星計算を実現し、自転角速度等の依存性をしらべるパラメーター計算に着手する。

(iii) 惑星大気：

高解像度火星大気の 60 火星日間（約 1/12 火星年）以上の積分を実施する。

アウトカム成果

・ポスト「京」運用開始 5 年後：

(i) 岩石惑星：

唯一 40 億年前の状態を保存する重力天体である月の熱史・火成活動史を予言し、探査データによりモデルを検証、更なる探査計画を提案する。

(ii) ガス惑星：

小規模不安定から渦へのエネルギー注入を陽に表現すると同時に、深部循環と表層循環とを統合した帯状流形成モデルの可能性を世界で初めて提案する。

(iii) 惑星大気：

小規模対流、ダストデビルから大循環に至る火星大気運動を表現し、多様なダスト現象の観測との比較検証を経て全球ダストストーム発生之谜に迫る。

・ポスト「京」運用開始 10 年後：

(i) 岩石惑星：

プレートテクトニクス表現の実現により、大型の惑星（地球、系外地球型惑星）の進化計算に迫る。

(ii) ガス惑星：

放射過程ならびに物質過程を導入し、太陽系あるいは太陽系外のガス惑星の構造進化の議論に資する計算を実現する。

(iii) 惑星大気：

モデルを順次拡張し、「あかつき」探査との対峙が期待される金星大気の対流解像全球循環計算を目指すとともに、太陽系あるいは太陽系外の地球型惑星大気の対流と大循環の多様性に迫る高解像度計算を実現する。

(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

「京」での実績はないが、「地球シミュレータ」での計算では大きな困難に遭遇した。(i) 岩石惑星では火成活動が短い時間刻みを要求し計算は 2 次元に限定された。(ii) ガス惑星では極めて長時間の計算が必須であるため解像度が限定された。(iii) 惑星大気では静力学モデルの限界に直面した。ポスト「京」により、(i) では 3 次元計算が、(ii) では微細対流と全球的構造を両立する超高解像度長時間計算が、また、(iii) では、「京」での理研 AICS チームの世界最先端の地球大気非静力学全球大循環計算を土台に非静力学計算がそれぞれ可能となる。

(5) 実施体制

サブ課題全体として大規模高解像度球殻流体計算に関するノウハウを共有しつつ、岩石惑星計算は東京大学が、惑星大気計算は神戸大学が、ガス惑星計算は京都大学が、それぞれ中心になって設計と開発、実装実験を進める。「京」上の大規模計算に関するノウハウは、地球大気計算において豊富な経験を持つ理研 AICS グループがこれを提供し、サブ課題 B の各モデルの設計改良開発の指南役となる。岩石惑星に関しては、東京大学が火成活動モデルや大規模並列設計を、愛媛大学が実装を、JAMSTEC が実装実験を主に担当して進める。惑星大気に関しては、神戸大学が火星大気を初期計算目標に理研 AICS の SCALE-GM を基に力学的な計算可能性を探り、順次、放射過程ならびに物質輸送過程の導入をすすめて計算パラメーターの拡張を実現する。北海道大学と九州大学はそこで必要となる物理過程の検討と開発を担う。ガス惑星に関しては、京都大学が大規模並列計算におけるスペクトル法の可能性の探求に着手し、その実装性能試験を経て、大規模計算に着手する。



2-3. サブ課題 C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」

(1) 目的・意義

ガリレオ以来 400 年以上にわたる太陽黒点の観測により、太陽黒点数は約 11 年の周期（太陽周期）で変動することが知られている。黒点近傍ではその磁場のエネルギーによりしばしばフレアやコロナ質量放出といった爆発現象が起きる。こうした太陽面爆発は、地球磁気圏や人工衛星、電力・通信網などに多大な影響を与えることがある。また、黒点数の長期変化は気候変動の原因の一つになるとも考えられている。このため、この太陽周期の機構を解明し、今後の太陽活動とその影響を予測することは将来の地球環境の変動予測と社会インフラの保全のために重要な課題である。同時に、太陽活動の理解は、広く恒星や宇宙プラズマの理解に繋がると共に、地上では実験できない非線形プラズマダイナミクスの実証的な理解にも通じる。

そのような動機に基づき、本研究では歴史的な課題でもある太陽周期の機構を解明すると共に、太陽フレアの発生条件を明らかにすることを目的とする。さらに、フレアに伴う宇宙環境の変動と人工衛星への影響を精密なシミュレーションを通して再現し、将来起きると考えられる巨大な太陽面爆発の社会影響の軽減に貢献することを目指す。

(2) 実施内容

千葉大学では、太陽対流層における熱対流と電磁流体ダイナモについて微細な対流から大規模構造の再生まで包括的に実現する計算をおこなう。従来の手法では対流層の一部しか扱うことができなかつたが、独自に開発した音速抑制法を使うことにより初めて太陽対流層全てを計算することができる。また、このスキームはノード間通信が少なく、「京」の全ノードを高効率で使った実績がある。本研究ではポスト「京」での高速計算を目指し、計算機科学の専門家の協力によって、コード自動生成・自動最適化の手法も駆使して高効率のコードを開発する。

名古屋大学では太陽表面に現れた黒点磁場が不安定化しフレア爆発を引き起こす条件を計算から探る。これまでの研究によって、大きなスケールの磁場のねじれと、小さなスケールの磁場の相互作用がフレア発生に重要であることが示唆されている。これを実証するため、世界最高精度で太陽表面を観測できる我が国の太陽観測衛星「ひので」で観測された精密磁場データを用いた実データ・シミュレーションを行うことにより、フレア爆発の発生条件を探り、その予測精度の向上に貢献する。また、協力機関（東北大学、神戸大学、京都大学）と協力し、太陽面爆発に伴う地球磁気圏の擾乱を電磁流体力学とプラズマ運動論の両面から再現することで、マクロスケールの変動が人工衛星周辺のマクロスケールの環境、特に宇宙機の運用に大きな影響を与える衛星帯電にどのような影響を与えるかについて計算を通して明らかにする。

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果

・平成 29 年度終了時：

太陽対流層全球から領域を区切った高解像度の計算を実行し、小スケールの乱流効果により、太陽物理学最大の謎である蝶形図の成因に迫る。領域・時間を制限しているが、世界初の対流層・表面連結計算を実行し、大規模黒点の出現を再現する。過去にフレアが発生した 300 領域の 3 次元平衡磁場を衛星観測に基づいたシミュレーションによって再現し、フレア再現シミュレーションの初期データとなるデータベースを構築する。

・本格実施フェーズ終了時：

黒点形成の源となる磁場形成過程を再現すると共に、太陽フレアの再現シミュレーションから、フレア発生条件となる磁場構造を明らかにする。地球磁気圏環境の変動とその中での高エネルギー粒子の生成・消滅を再現する。

・ポスト「京」運用開始 5 年後：

これまで不可能だった黒点の自発的形成過程を再現する。フレアにおいて重要な役割を果たす磁気リコネクションの内部構造と粒子加速を再現する。磁気嵐における人工衛星の帯電過程を衛星の形状や表面素材の影響を正確に取り入れて再現する。

アウトカム成果

・ポスト「京」運用開始 5 年後：

400年間の謎であった黒点の起源に迫り、太陽周期の物理メカニズムに関する知見を得る。現実の観測データに基づくフレアの再現を行い、その発生予測に貢献する。磁気嵐における衛星帯電の原因を明らかにする。

・ポスト「京」運用開始10年後：

数周期にわたる太陽活動の計算を行い、太陽活動の予測可能性を高める。太陽フレアの発生とその影響としての衛星帯電を動的に予測する。

(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

(「京」でできていること)

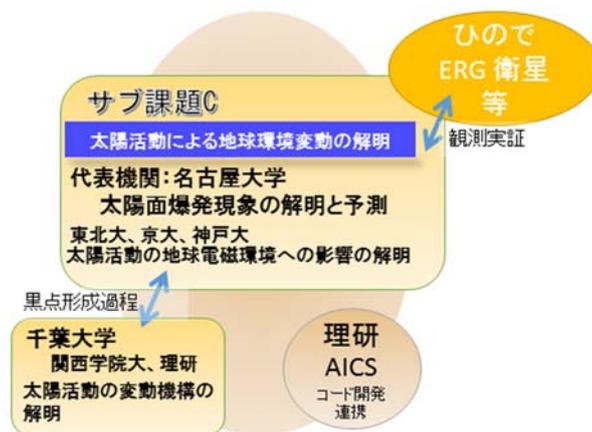
現在の世界最高解像度である $256 \times 768 \times 1536$ という計算を50年程度実行し、不安定な周期活動を再現している (Hotta et al. 2016, Science)。また、より高解像度の 4.3×10^{12} (=4096×32000×32000) の格子点数を用いた全ノード計算を極短時間おこない、世界最高に近い理論ピーク性能比(24%)を達成している。

(ポスト「京」でなければならないこと)

ポスト京では、表面における黒点生成までを扱うことができる。フレア爆発において人工的な抵抗を導入せずに、微細構造と大規模構造を同時に解くことができる。衛星の誘電膜部分の衛星帯電を正確に計算することができる。

(5) 実施体制

太陽対流層における熱対流と磁場を微細な対流から大規模構造の再生までを包括的に実現する計算を千葉大学が担当する。この計算結果の解析を関西学院大学が、また超並列計算コードの開発を理研が支援する。一方、名古屋大学では太陽表面に現れた黒点磁場が不安定化しフレア爆発を引き起こす条件を計算から探り、フレア爆発の予測精度の向上に貢献する。また、協力機関である京都大学では太陽面爆発に伴う地球磁気圏の擾乱を精密な電磁流体シミュレーションで再現する。さらに、同じく協力機関である神戸大学では、磁気嵐の際に現れる高エネルギー粒子加速と衛星近傍の電磁場変動を再現し、人工衛星の帯電予測を行う。なお、本研究はJAXA宇宙科学研究所の「ひので」衛星プロジェクト、文部科学省新学術領域研究「太陽地球圏環境予測」とも協力して実施される。



2-4. サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

(1) 目的・意義

地球上の生命の起源はいまだに明らかにされていないが、1953年の Miller の実験によりアミノ酸などの有機物が単純な物質から無生物的に合成されることが示され、生命の起源は原始地球での化学進化であるとする説が有力視されてきた。しかしながら、1969年オーストラリアに落下した Murchison 隕石からアミノ酸が検出され、生命は宇宙から飛来した物質を起源と考える「宇宙起源説」が浮上した。さらに Murchison 隕石以外の炭素質コンドライトからもアミノ酸が検出され、2009年には NASA の探査機スターダストにより彗星の塵からアミノ酸の一つであるグリシンが見つかった。2010年には、1200~1300 K の高温環境を経験した Almahata sitta 隕石からアミノ酸が検出され、非常に高温の小惑星が冷える過程で生じる反応でアミノ酸が生成される可能性のあることがわかった。アミノ酸は、実験室で生成すると、左巻き(L型)と右巻き(D型)が同量生成される。しかし、地球上の生命はほとんどL型のアミノ酸しか使っていない。これは、鏡像異性体過剰と呼ばれ、パストゥール以来150年以上の謎になっている。1997年になって Murchison 隕石のアミノ酸を詳しく調べたところ、鏡像異性体過剰が発見された。これによって、アミノ酸の鏡像異性体過剰が宇宙空間で起こり隕石を通じて地球に運ばれ、これを元にして生命が誕生したという可能性が注目されている。本サブ課題では、原始太陽系における有機分子の生成過程と鏡像異性体過剰の発生過程を大規模な量子化学第一原理計算によって探究する。

(2) 実施内容

本サブ課題では、基底状態量子化学計算を用いて惑星間ダスト、特に氷ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析を行う。その計算によって得られた速度定数などの物理量を用いて、気層や表面での反応速度方程式を第一原理に基づき解くことで、宇宙空間における有機分子進化過程を明らかにする。具体的には、量子化学計算を用いた数百からなる素反応の安定構造・遷移状態構造の解析、および Born-Oppenheimer 近似に依らない量子力学効果を入れた *ab initio* 分子動力学である励起状態分子動力学計算 (Surface Hopping) 法を用いて、有機分子の励起状態遷移量子ダイナミクスをシミュレーションする。また、近年の実験で円偏光波を当てるとアミノ酸の鏡像異性体過剰が引き起こされることが分かってきた。さらに、星形成領域で円偏光波が実際に観測されている。従って、原始惑星系の近くで大質量星が誕生したとすれば、太陽系内でアミノ酸の鏡像異性体過剰が引き起こされた可能性がある。宇宙空間で円偏光波による鏡像異性体過剰を計算するために大規模な励起状態分子動力学計算を実施する。また、原始惑星系円盤内におけるダスト形成・成長過程の解明に向けて、乱流中のダスト粒子の衝突付着成長シミュレーションを行う。

(3) 目標・期待される成果

アウトプット成果

・平成29年度終了時：

励起状態量子化学計算を用いて氷ダスト上での有機分子合成および分解の素反応の網羅的解析を行うことで、ダスト表面反応の影響、温度などの環境効果、紫外線や宇宙線などの強い外場の影響を

解明する。また、原始惑星系円盤乱流中のダストの成長過程を非圧縮流体計算により探究する。

・ **本格実施フェーズ終了時：**

励起状態分子動力学計算法を用いて、有機分子の励起状態遷移量子ダイナミクスについての大規模な励起状態分子動力学計算を実施し、宇宙空間の円偏光波による鏡像異性体過剰を明らかにする。また、原始惑星系円盤乱流中の微惑星形成過程を圧縮流体計算により探究する。

・ **ポスト「京」運用開始5年後：**

原始太陽系における有機分子生成の第一原理計算を世界に先駆けて実現することで、ダストから微惑星、微惑星から惑星が誕生する過程で、どのように物質が進化し、有機分子が生まれたかを明らかにする。そして、第一原理計算結果と ALMA 望遠鏡等による現在の惑星間空間に残された有機分子の検出や、「はやぶさ2」や「たんぽぽ計画」等による太陽系始原物質のデータとの突合せから、太陽系における生命の起源の解明に迫る。

アウトカム成果

・ **ポスト「京」運用開始5年後：**

励起状態分子動力学法を用いて真空中・氷ダスト上での有機分子合成および分解の実時間シミュレーションを実行し、様々な環境における反応分岐比の定量的計算を行い、宇宙における分子進化予測手法を確立する。また、原始太陽系におけるダスト成長と有機分子生成過程の関係を明らかにする。

・ **ポスト「京」運用開始10年後：**

これを太陽系外惑星系での異なる環境下での有機分子生成過程の研究に発展させることで、太陽系以外での生命の発生の可能性を探究することができる。太陽系外惑星系の有機分子は、今後 ALMA 望遠鏡等により直接検出される可能性がある。

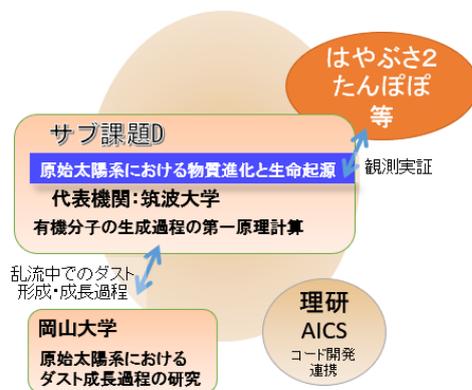
(4) 「京」でできていること、ポスト「京」でなければならないこと

「京」では、高度最適化により、ナノ物質の10万原子第一原理計算を実施、大規模並列計算で高い実効効率を実現し、第一原理計算（密度汎関数法）により、真空中における有機分子の最安定構造を計算した。また、その他の計算機資源で、時間依存密度汎関数法計算により、円偏光波吸収による円偏光二色性とアミノ酸の光励起による崩壊・改変反応の過程を解析している。さらに、惑星間空間のアミン酸前駆体からアミノ酸への生成過程に対し、反応物及び中間体の生成エネルギーから安定性と反応のエネルギー障壁を評価した。ポスト「京」では、惑星間空間物質の化学進化に関してさらに多くの素反応の解析や、量子分子動力学の計算が可能になり、これによって原始太陽系環境下でのアミノ酸生成過程とL体-D体分離過程の励起状態第一原理シミュレーションを実現することが可能となる。

(5) 実施体制

筑波大の重田、相川、古家、および特任助教は、量子力学・分子力学混合法（QM/MM法）を用いて、ダスト上のアミノ酸・核酸の基底状態並びに励起状態を計算し、合成・分解の素反応を解析する。

筑波大の梅村、重田、庄司は、励起状態分子動力学計算法（Surface Hopping 法）を用いてアミノ酸の励起状態遷移量子ダイナミクスをシミュレーションし、鏡像異性体過剰プロセスを解析する。これらは、「はやぶさ2」や「ロゼッタ」等の観測結果と比較する。筑波大の梅村、道越、[岡山大](#)の石原は、[乱流物理を考慮した](#)ダスト成長の大規模計算を実施する。



3. 採択時の留意事項への対応状況

3-1. ポスト京利用に向けて、計算の大規模化等の利用準備の具体的なシナリオを明確にすること

サブ課題A. 「惑星の起源の解明」

- 現在「京」で利用している Kninja と、天文台等で利用している Athena について、ポスト「京」を想定したチューニング、並列化効率の向上を行う。
- Kninja については、現在利用している直接計算独立時間刻み法を我々が開発したツリー法と直接計算法のハイブリッド法に置き換えるための開発をおこなっており、ほぼ完成している。これにより、これまで数十万粒子であった計算規模をポスト「京」では1億粒子程度まで飛躍的に拡大させる。

サブ課題B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

- 岩石惑星：マグマの生成移動モデルを開発しマントル対流モデル ACuTEMan に実装する。コードの中核部分に関しては、これまで技術的蓄積のある地球シミュレータ上にて大規模並列計算における効率向上の検討を進める。これを基礎データとして、「京」、ポスト「京」でのメモリー構造等を考慮した並列プログラムの設計と実装に着手し、改良をすすめる。
- ガス惑星：超高次球面調和函数変換のための新たな計算スキームの開発と並列化効率向上の可能性の追及・実証は、これまでの技術蓄積のある地球シミュレータならびに京都大学情報基盤センター等の計算機にて進める。これを基礎データとして、「京」、ポスト「京」でのメモリー構造等を考慮した並列プログラムの設計と実装に着手し、改良をすすめる。
- 惑星大気：地球大気を対象に「京」で経験を積み重ねてきた SCALE-GM を基に、鉛直計算領域の高度 100 km 程度への拡張と、大気成分・大気質量・太陽定数・惑星半径等の火星化を「京」上にてすすめる。大規模並列計算のアルゴリズムは地球大気を対象とした現有の経験がそのまま活用できると期待されるが、強い熱対流を表現することならびに地表面から高高度に至る鉛直計算領域をカバーするのに必要とされる計算資源量は未知であり、数値実験を重ねて、その計算可能性を探る。

サブ課題C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」

- 太陽対流層アプリケーション AMaTeRAS について、ポスト京を想定したチューニングを現開発者と計算科学研究者の協力により実行し、並列化効率・浮動小数点演算効率の向上を目指す。特に自動チューニングの手法を発展させ、効率的・革新的な性能向上を目指す。
- AMaTeRAS では音速抑制法により京全ノードまで、太陽対流層計算について並列化効率を保つことが可能になっており、ポスト京の規模まで並列化効率を保つことが予想される。今後は、表面の黒点発生現象を解くときに必要不可欠である輻射輸送を取り入れる。ポスト京の規模でも効率が落ちないように、輸送方程式の形式解を用いる手法を現在実装中である。
- 地球磁気圏環境の MHD および粒子モデルプラズマシミュレーションに関して、ポスト京で採用される ARM アーキテクチャプロセッサの重要な性能源泉と考えられる高 bitSIMD ベクトル演算機構を最大限に活用するため、演算ループを高効率にベクトル化する技術、メモリアクセスや制御フローの不規則性を排除する技術を探求する。これとメニーコア並列化技術と合わせ、ポスト京に対応した高性能アプリケーションを開発する。

サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

- 現在「京」で利用している RSCPMD について、ポスト「京」を想定したチューニング、並列化効率の向上を行う。
- RSCPMD については、励起状態の日断熱ダイナミクスのための開発をおこなっている。これにより、これまで基底状態の解析にのみ適応可能であった計算規模を、ポスト「京」では励起状態感遷移まで取り扱うことが可能となる。

3-2. 必要に応じて、計算機、アプリケーションの専門家の参画を検討すること

現在、理研 AICS の粒子系シミュレータグループとの連携の他、フラッグシッププロジェクトとも意見交換しながら開発を進めている。

3-3. 重点課題9「宇宙の基本法則と進化の解明」との役割分担を明確にすること

重点課題9では銀河形成より下の階層の構造形成・進化は扱わないのに対して、萌芽的課題では銀河形成から惑星形成までを扱うので、切り分けはできている。

4. 中間評価における指摘事項への対応状況

4-1. 目標の明確化について

指摘事項：

課題全体として達成すべき成果を明確にするとともに、その成果実現に向けた定量的・定性的な目標（年間目標及び最終目標）を明確にすること。その際、目標、成果の国際的な先進性を明確にすることおよび、各サブ課題の進捗等を鑑み、選択と集中による効率的な計画を検討すること。特にサブ課題 D について進捗を明確にするよう留意すること。

対応：

●本課題の達成すべき目標

太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源、その惑星系で生命を育む惑星がどのように進化したか、惑星の構造の進化および大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野にまたがる個別のプロセスを探求することによって、惑星形成から生命進化までを統一的に理解することへつなげるのが本課題の究極の目的である。これに向けて、各サブ課題では以下を目標として研究開発を進める。

サブ課題A. 「惑星の起源の解明」

原始惑星系円盤の電離状態を正確に記述した上で非理想 MHD 効果を全て考慮した円盤の大域的進化計算を実現し、その条件のもとに大域的な惑星形成の多体計算を現在の 2 桁上の 1 億粒子以上で実現し、星間ダストから惑星までの集積過程を統一的に計算可能にすることを目標とする。これによって、円盤と系外惑星の観測データを整合的に説明する一般的惑星形成モデルの構築、さらには系外惑星系のハビタブル・ゾーンに存在する地球型惑星の大気観測や生命存在を示すバイオマーカー観測の議論につなげる。

サブ課題B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

様々な惑星の内部・表層の進化の統一的理解に寄与すべく、岩石惑星の火成活動・マンテル対流、ガス惑星の球殻熱対流、地球型惑星とくに火星の大気循環の高解像計算を実現する。マンテル対流では、開発中のプレートテクトニクスの 3 次元モデルを完成させ、これまでに開発した 3 次元火成活動モデルと合体させることで実現する。それを月の熱史・火成活動史の解明に適用する。惑星大気では、正二十面体準一様格子の非静力学全球大気モデルの火星大気版を開発し全球高解像度計算を実現する。火星の小規模対流、ダストデビルから大循環に至る火星大気運動を陽に表現した計算を実施し、全球ダストストーム発生の謎に迫る。ガス惑星大気では、超高次球面調和関数変換の並列高速計算ライブラリを新たに開発し、回転球殻熱対流モデルに導入する。それによる高解像度の数値実験を行い、ガス惑星の帯状流の成因を探る。

サブ課題C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」

太陽磁場の起源である太陽対流層の第一原理的シミュレーションにより黒点、太陽活動の長期変動の起源を明らかにすると共に、太陽磁場から太陽フレア、太陽風とコロナ質量放出が地球電磁気圏

に与える影響を多階層シミュレーションにより統一的に明らかにする。さらに、太陽観測衛星、地球観測衛星等のデータと融合した解析により太陽地球惑星圏環境の短期・長期変動予測を行う。このため、太陽対流層の底から表面までを一貫して解く計算を世界で初めて実行する。さらに、太陽表面から太陽コロナ全体を含んだ太陽面爆発の大規模シミュレーションを開発する。一方、地球磁気圏の変動と人工衛星へのその影響を評価・予測するマルチスケール・シミュレーションの開発のために、省メモリかつ数百万並列環境に対応可能なスケーラブル通信ライブラリを、MHD・PICモデル間の情報受け渡しに適用し、高効率な地球磁気圏-人工衛星環境連成シミュレーションを実現する。

サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

基底状態量子化学計算を用いて惑星間ダスト、特に氷ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析を行う。その計算によって得られた速度定数などの物理量を用いて、気層や表面での反応速度方程式を第一原理に基づき解くことで、宇宙空間における有機分子進化過程を明らかにする。さらに、宇宙空間で円偏光波によるアミノ酸の鏡像異性体過剰を計算するために大規模な励起状態分子動力学計算を実施する。また、原始惑星系円盤乱流中のダストの濃集・衝突・合体の成長過程をナビエ・ストークス方程式の直接数値計算に基づいてシミュレートし、微惑星形成過程を明らかにする。

年間目標は下記の図の通りとする。

サブ課題及び小項目	平成28年度	平成29年度	平成30年度	平成31年度
(1) サブ課題A 惑星の起源の解明				
(1-1) サブ課題A全体の統括および惑星集積シミュレーション	惑星集積シミュレーションコードの開発	大域的重力N体シミュレーションの実行	大域的重力N体シミュレーションの実行・観測データとの比較検討	
(1-2) 星形成・原始惑星系円盤の大規模シミュレーション	磁気流体シミュレーションコードの開発	非理想磁気流体シミュレーションの実行	非理想磁気流体シミュレーションの実行・観測データとの比較検討	
(1-3) 並列計算コード開発、サブ課題間連携推進	大域的N体シミュレーションの開発	「京」を用いたコードの最適化		
(2) サブ課題B 惑星内部・表層のダイナミクスと進化				
(2-1) サブ課題B全体および「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」の統括推進	大気モデル改良開発と必要となる基礎ルーチンの開発	大気大循環モデルにおける現実火星状態の再現性検証	火星全球高解像度実験・全球ダストストーム発生条件の理解	より広い惑星パラメータへの計算対象拡張
(2-2) 岩石惑星の火成活動～マントル対流系の三次元球殻モデリング統括推進	マントルモデル改良開発と必要となる基礎ルーチンの開発	マントル対流モデルへの火成活動の導入	マントルに関する高解像度実験・月のマントル進化モデルの確立	月形成過程への制約の検討
(2-3) ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流までの統括推進	ガス惑星モデル改良開発と必要となる基礎ルーチンの開発	球面調和関数ルーチンの最適化	ガス惑星に関する高解像度実験	木星型惑星表層積状ジェット流の成因の検討
(3) サブ課題C 太陽活動による地球環境変動の解明				
(3-1) サブ課題C全体の統括および太陽フレアとその地球環境影響のシミュレーションの開発	フレアモデル・磁気圏モデル・衛星環境モデルの開発	フレア・磁気圏・衛星環境の初期実験	フレア再現・超高精度磁気圏モデル実験・衛星環境モデルの開発・計算	フレア再現・超高精度磁気圏モデル実験・衛星環境モデルの計算結果の解析
(3-2) 太陽対流層の超大規模・長時間シミュレーション	太陽対流層モデルの計算		太陽黒点形成の実験コードの開発・太陽周期変動の機構の検討	太陽黒点形成の実験
(4) サブ課題D 原始太陽系における物質進化と生命起源の探究				
(4-1) サブ課題D全体の統括および星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算の実施	第一原理分子動力学計算に向けた研究計画の策定	ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析	ポストT2Kによる大規模な第一原理分子動力学計算	ポスト「京」での大規模な第一原理分子動力学計算の計画策定

●独創性・先進性について

サブ課題A. 「惑星の起源の解明」

惑星集積シミュレーション：

微惑星の段階からの直接フル N 体計算で衝突破壊や原始惑星系円盤からのガス抵抗の効果をとり入れた計算コードは他にない。これらの効果を考慮しないと、原始惑星の暴走成長段階で異なる結果が得られてしまうため、本課題におけるフル N 体計算の必要性が強く示唆される。

原始惑星系円盤の磁気回転流体シミュレーション：

多様な物理過程と高い性能を両立する最先端の宇宙物理学向け磁気流体シミュレーションコードである Athena++を用いている。これによって、現時点で最も現実的な物理過程を含む高解像度計算を行うことができる。

サブ課題B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

マンテル対流：

対流しつつあるマンテルにおけるマグマの生成・移動のシミュレーションに成功した例は他にない。また、プレートテクトニクスのモデリングにおいては、「強いプレートのレジーム」を目指した例も他にはなく、プレートテクトニクスの物理的メカニズムを正しく再現する独創的な研究である。

惑星大気：

解像度 1km 以下の計算は、数 km スケールの乾燥対流も陽に表すことができるもので、先駆的である。金星、地球、火星、系外惑星も含めた地球型惑星大気の対流と大循環の多様性に包括的に迫るための計算基盤の構築を目指すところが野心的かつ独創的である。

ガス惑星大気：

全球計算に基づいたガス惑星の縞状構造成因の解明を目指している点が新規的かつ独創的である。

サブ課題C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」

太陽対流層モデル：

音速抑制法の採用により分解能の点で他国に比べて圧倒的優位性を持っている。黒点生成現場を捉えるという目的においても、密度比 600 以上と他国のコードより幅広い値を取ることができている。

磁気圏・衛星環境モデル：

プラズマ粒子シミュレーションにおける分散メモリ並列・共有メモリ並列・SIMD ベクトル化の最適化を進めているが、このような試みは世界的にもほとんど例がない。これと大規模電磁環境を再現する MHD シミュレーションの現実的な連成は過去に例が無く、先進的である。

太陽フレアモデル：

観測磁場データを取り入れた太陽フレア計算は過去にも実施されているが、本課題では現実的な磁場モデル(非線形フォースフリー磁場)導出に成功し、シミュレーションに採用している。これと電磁流体シミュレーションと組み合わせた研究は世界的にも稀で、非常に独創的かつ優位的であるといえる。

サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

有機分子形成・ダスト成長：

原始太陽系円盤内の有機分子形成の研究は、これまで古典的な反応方程式を解くものであったが、本研究では、QM/MM(Quantum Mechanics/Molecular Mechanics)法や CPMD(Car Parrinello Molecular Dynamics)法などの量子分子動力学計算によって探究するものであり、これまでに例のない研究である。原始太陽系円盤乱流によるダスト成長の計算は、これまで実現していない高精度(高レイノルズ数)の計算であり、ダスト成長過程を直接入れた計算も世界初である。

サブ課題 D は、第一原理分子動力学法を宇宙物理に応用することで、原始太陽系円盤内の有機分子形成を解明することを目的としている。これには、前段階として基礎となるべき物理素過程を理論的に理解することが必須である。本課題において、アミノ酸形成の反応機構を理論的に解明し、触媒水分子の効果が重要であることを示した(Kayanuma et al. 2017)。このような基礎研究に基づいて反応ネットワークの構築を進めており、その上でダスト形成過程の大規模計算を実行する。調査研究・準備研究フェーズとしては、現時点での進捗は当初の予定通りである。

4-2. 成果発表について

指摘事項：

計算科学技術分野における研究開発の論文数、学会発表数は、事業の成果を議論する上で1つの指標となりうるため、分野の特性、体制を考慮の上、論文、学会発表を通じて十分に成果を発信するような計画とすること。

対応：

査読論文への投稿については、惑星科学全般では Icarus、サブ課題 A、C、D では Astrophysical Journal や Monthly Notices of the Royal Astronomical Society、サブ課題 B では Journal of Meteorological Society of Japan や Journal of Atmospheric Sciences、Journal of Geophysical Research、Physics of the Earth and Planetary Interiors、Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics、Journal of Fluid Mechanics など、サブ課題 C では Physics of Plasmas を検討中である。科学分野全般に対するインパクトが強い成果も期待されるため、これらは Nature、Science への論文投稿も視野に入れる。これらは本課題参加者がこれまでに多くの論文出版の経験のある学術誌であり、本課題における成果発表として適切であると考えられる。

国内の学会(日本天文学会、日本惑星科学会、日本気象学会、日本地球惑星科学連合大会、等)ではサブ課題ごとに定期的に講演を行っており、また国内・国外を問わず開催される国際会議にも積極的に参加・講演してきている。これらは継続的に行い、成果発表のさらなる充実を図る。

4-3. ポスト「京」での具体的な目標について

指摘事項：

予備計算などを通じて、サイエンス、エンジニアリング的な目標を明確にすること。その目標に対して、ポスト「京」でいつまでに何をどこまで明らかにすることを目指すのかを明確にすること。その時点でポスト「京」で初めてできる画期的な利活用について具体的に説明すること。

対応：

サブ課題A. 「惑星の起源の解明」

惑星集積シミュレーション：

動系方向により広範囲(例えば、太陽系で言えば、地球型惑星から木星、土星の軌道までを含む0.5-10天文単位)のシミュレーションを行い、数天文単位以遠では氷物質が凝縮することで固体量が増える効果(アイスラインの効果)も取り入れる。微惑星の成長と衝突破壊、全ての天体に円盤ガスからのガス抵抗や円盤との重力相互作用によるタイプ1惑星移動の効果も働くようにし、木星や土星のような巨大ガス惑星のコアの形成について、微惑星段階からのグローバルなシミュレーションによって明らかにする。ガス抵抗は微惑星や衝突破片の動径方向への移動、タイプ1惑星移動は原始惑星の動径方向への移動を引き起こすので、グローバルなシミュレーションが必須である。コアへの原始惑星円盤ガスの流入の効果も入れ、様々な円盤初期条件のもとでのシミュレーションを行うことによって、現在、発見されている系外惑星系の多様性の起源の問題、ハビタブル・ゾーンにおける地球型惑星の形成確率、そのような地球型惑星への水の輸送プロセスなどを明らかにすることで、今後、生命居住可能な表層環境を持つ惑星(ハビタブル惑星)の形成確率、多様性の問題に迫る。

原始惑星系円盤の磁気回転流体シミュレーション：

Athena++を用いた原始惑星系円盤のシミュレーションは順調に進展しており、今後も自己重力等の新たな物理過程の開発と並行して研究を進める。ALMAによって原始惑星系円盤の構造は明らかになってきており、その観測データとの比較検討も積極的に行いたい。また、原始惑星系円盤は惑星系の初期状態であり、このシミュレーションの結果は順次、惑星集積シミュレーションにとりいれていく。

ポスト「京」の利活用：

「京」では、惑星形成多体計算向けコード **Kninja** を開発し、世界初の1000ノードを超える惑星形成多体計算に成功、30万粒子程度までの計算を可能にし、前例のなかった大域計算を行うことができた。ポスト「京」では、アルゴリズムの改良も行うことでこの1000倍程度、数億粒子の計算での大域惑星形成過程を世界で初めて明らかにする。

星形成の計算コードは「京」での大規模利用の実績はまだないが、天文台の Cray XC30 等の大規模並列計算機でよいスケーラビリティを示す Athena++コードを米国と共同で課題実施者が開発しており、ポスト「京」での 10 億格子点・1 億時間ステップ程度の計算を行う計画である。これは 1 モデルで「京」で 1 週間程度の計算となり、多数行うことは「京」では不可能だが、ポスト「京」では現時点的な資源量で実行可能である。これにより、多様な原始惑星円盤の構造と進化を明らかにする。

サブ課題 B. 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

マントル対流：

マグマの三次元空間での生成・移動のシミュレーションは順調に進んでおり、現在矩形領域での計算用に書かれているコードを実際のマントルの幾何学的形状である球殻領域での計算にも適用できるように改良する。さらにこのコードで用いられている疑似圧縮法の改良に取り組み、地球のダイナミクスを理解する上で重要なプレートを数値的に再現する事を目指す。

惑星大気：

SCALE-GM の火星化開発は順調に進捗しており、このまま継続する。QBO 的振動として顕在化した数値解の数値解法依存性は、当初計画には含まれない課題ではあるが、惑星大気計算の根幹に関わる重要な問題であるため、火星化開発と平行して、その詳細を探求していく。また、火星 SCALE-GM が完成し、これまでにない高解像度計算が可能となれば、火星気象学の進展が大いに期待される。SCALE-GM の火星化が完了した後は、金星大気への対応を進める。これにより、現在「地球シミュレータ」で実現している解像度よりもさらに高い解像度が実現でき、金星大気循環において重要と考えられている雲層内の熱対流と、大気大循環を同時に計算できるようになり、金星気象学のさらなる発展に資する。

ガス惑星大気：

球面調和関数ルーチンの開発を、「京」および、長い SIMD を持つ点でアーキテクチャがより類似している最新のメニーコアプロセッサ上で行っている。この開発されるルーチンはポスト「京」に限らず一般的なメニーコアマシン上でも高性能を発揮するものである。

ポスト「京」の利活用：

サブ課題 B に関連する課題は、「地球シミュレータ」での計算では大きな困難を経験した。(i) 岩石惑星では火成活動が短い時間刻みを要求し計算は 2 次元に限定された。(ii) ガス惑星では極めて長時間の計算が必須であるため解像度が限定された。(iii) 惑星大気では静力学モデルの限界に直面した。ポスト「京」により、(i) では 3 次元計算が、(ii) では微細対流と全球的構造を両立する超高解像度長時間計算が、また、(iii) では「京」での理研 AICS チームの世界最先端の地球大気非静力学全球大循環計算を土台に非静力学計算がそれぞれ可能となる。

サブ課題 C. 「太陽活動による地球環境変動の解明」

太陽対流層モデル：

高解像度化・大規模化した計算を開始するための準備は順調に進行している。今後は太陽表面層を取り入れるための準備に取り掛かる。太陽表面層を取り入れることで、フレアモデルグループとも協力が可能になる。

磁気圏・衛星環境モデル：

プラズマ粒子シミュレーションの超並列高効率計算に関しては、アーキテクチャ階層毎に多岐に渡る開発項目があるが、現状それらは着実に進行している。計算モデルについては、磁気圏グローバル環境シミュレーションの計算結果を衛星環境シミュレーションに反映することで、より現実性の高い衛星帯電予測が可能になる。

太陽フレアモデル：

解適合格法を実装した電磁流体計算コードを用いての大規模数値計算を実施することで、太陽フレアからコロナ質量放出までの一連のプロセスを再現し、その物理過程を理解する。現在、手元の計算機において低解像度のテスト問題を実施しており、その後は大規模計算機に移行し高解像度計算を実施する。

ポスト「京」の利活用：

太陽対流層に関して現在の世界最高解像度である $256 \times 768 \times 1536$ という計算を 50 年程度実行し、不安定な周期活動を再現している。また、より高解像度の $4.3 \times 10^{12} (=4096 \times 32000 \times 32000)$ の格子点数を用いた全ノード計算を極短時間おこない、世界最高に近い理論ピーク性能比を達成している。ポスト「京」では、表面における黒点生成までを扱うことができる。フレア爆発において人工的な抵抗を導入せずに、微細構造と大規模構造を同時に解くことができる。衛星の誘電膜部分の衛星帯電を正確に計算することができる。

サブ課題D. 「原始太陽系における物質進化と生命起源の探究」

有機分子形成・ダスト成長：

当初計画の原始太陽系円盤内の有機分子形成に加えて、大規模乱流中のダスト成長の研究を追加した。これは最終的にダスト上での有機分子形成と有機分子間力によるダスト付着成長過程で結びつくものである。この研究は、雨成長の物理モデルとして気象分野への波及効果が期待できる。

ポスト「京」の利活用：

「京」では、高度最適化により、ナノ物質の 10 万原子第一原理計算を実施、大規模並列計算で高い実効効率を実現し、第一原理計算（密度汎関数法）により、真空中における有機分子の最安定構造を計算した。また、その他の計算機資源で、時間依存密度汎関数法計算により、円偏光波吸収による円偏光二色性とアミノ酸の光励起による崩壊・改変反応の過程を解析している。さらに、惑星間空間のアミン酸前駆体からアミノ酸への生成過程に対し、反応物及び中間体の生成

エネルギーから安定性と反応のエネルギー障壁を評価した。ポスト「京」では、惑星間空間物質の化学進化に関してさらに多くの素反応の解析や、量子分子動力学の計算が可能になり、これによって原始太陽系環境下でのアミノ酸生成過程と L 体-D 体分離過程の励起状態第一原理シミュレーションを実現することが可能となる。

有機分子形成については、現在の遷移状態探索計算から、大規模な第一原理分子動力学計算に移行していく。乱流中のダスト成長の研究では、これまでのレイノルズ数千の計算をさらに大規模化し、レイノルズ数万の計算を実施する。

4-4. サブ課題間の連携等について

指摘事項：

幅広いサブ課題の間の積極的な連携を通して発生する相乗効果や、太陽フレアや宇宙天気等、インパクトのあるテーマを活用したアピールの計画を検討すること。

対応：

本課題では、惑星形成から生命進化までを統一的に理解することを目的としている。ただし、これらを 1 つの「まるごと」計算で理解できる段階にはないため、本格研究フェーズへ進むに当たっては、サブ課題 A で形成された惑星がサブ課題 B での惑星進化計算と結合し、サブ課題 C での太陽活動の変動を踏まえつつも、並行してサブ課題 D での分子進化計算に関連づけることを計画している。すでにサイエンスの面では、月の火成活動やマントル対流の計算結果について、地球-月系の形成進化過程との関連性について議論を始めつつある(サブ課題 A・B)。また、乱流中のダスト成長の研究は原始惑星系円盤の構造と進化に深く関係しており、さらにダスト成長は **pebble accretion** や微惑星形成過程を考える上で必須の研究課題でありサブ課題間の連携が重要となる(サブ課題 A・D)。コード開発や方法論については、メニーコアにおける球面調和関数展開の高速計算について密接な議論を行っており(サブ課題 A・B)、球座標の AMR(Adaptive Mesh Refinement)法などの計算コードや技術的な知見の共有を進めている(サブ課題 A・C)。

太陽フレア現象は、地球で発生する地震と異なり、爆発の駆動エネルギーを担う太陽の磁場の詳細観測データが得られているため、発生の有無は事前に予測ができるようになってきた。サブ課題 C では、これをさらに進め、磁場構造の解析からフレアの規模までも正確に予測することを目指している。実際、平成 29 年 9 月 6 日に発生した X クラスの大規模な太陽フレアで見られた磁場構造は、シミュレーション結果ときわめてよい一致を示していた。本課題では、これに加えて、太陽観測衛星、地球観測衛星等のデータと融合した解析により太陽地球惑星圏環境の短期・長期変動予測を行うことで、人工衛星・航空機・通信・電力などに対する太陽活動の社会影響を軽減するための技術開発も目的としている。これは科学的観点だけでなく、社会的課題としてもインパクトが大きいテーマであり、研究成果を積極的に社会還元する努力は継続する。

本課題は、ALMA やすばる望遠鏡といった地上観測、金星探査機「あかつき」、太陽観測衛星「ひので」、小惑星探査機「はやぶさ 2」、国際宇宙ステーションきぼう実験棟における「たんぽぽ計画」など、既存・進行中の観測・探査計画と深く連携するが、それに留まらず、将来の我が国の太陽系探査計画が依って立つ土台となるという点で国家的見地からの意義も高い。従来太陽系探査は欧米

の主導のもとに行われてきたが、このような状況を打開し、科学的価値の高い探査を行うためには、惑星内部進化に対する独自の統一的視点を確立することが必須である。本課題はそのような独創的な視点を確立するためのものと位置づける。

(別紙1) 実施機関一覧

	実施機関	備考
	神戸大学 (牧野 淳一郎)	代表機関 (課題責任者)
サブ課題A	東京工業大学 地球生命研究所 (井田 茂)	分担機関 (サブ課題責任者)
	大阪大学 理学研究科	分担機関
	理化学研究所 計算科学研究機構	分担機関
	東北大学	協力機関
	名古屋大学	協力機関
	一関高等専門学校	協力機関
サブ課題B	神戸大学 理学研究科 (林 祥介)	分担機関 (サブ課題責任者)
	東京大学 大学院総合文化研究科	分担機関
	京都大学 数理解析研究所	分担機関
	愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター	協力機関
	JAMSTEC 地球深部ダイナミクス研究分野	協力機関
	京都大学 学際融合教育研究推進センター	協力機関
	京都大学 理学研究科	協力機関
	京都大学 防災研究所	協力機関
	理化学研究所 計算科学研究機構	協力機関
	北海道大学 理学研究院	協力機関
	九州大学 理学研究院	協力機関
	サブ課題C	名古屋大学 宇宙地球環境研究所 (草野 完也)
千葉大学 大学院理学研究科		分担機関
関西学院大学		協力機関
京都大学 学術情報メディアセンター		協力機関
神戸大学		協力機関
東北大学		協力機関
理化学研究所 計算科学研究機構		協力機関
サブ課題D	筑波大学 計算科学研究センター (梅村 雅之)	分担機関 (サブ課題責任者)
	岡山大学大学院環境生命科学研究科	分担機関