ポスト「京」萌芽的課題

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」

研究代表者：牧野 淳一郎

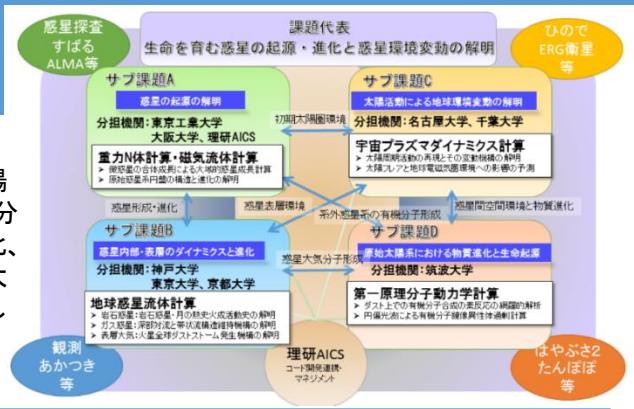
代表機関：神戸大学

- 提案概要・実施体制
- 各サブ課題の取り組み状況・成果、平成29年度の実施計画について
- 新しい計算アルゴリズムの開発とサブ課題間の連携

ポスト「京」萌芽的課題公募提案

生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明

神戸大学 理学研究科 教授 牧野 淳一郎（研究代表者）



概要

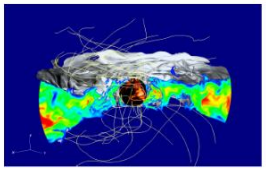
地球がどのように生まれ、どのようにして生命を育む惑星に進化したか、さらには現在及び将来の地球・太陽・太陽系の進化が人類社会にどのような影響を及ぼしうるかを解明するため、惑星科学・地球科学・宇宙化学/宇宙生物学分野のシミュレーション研究者が結集し、太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。

実施内容、実施体制

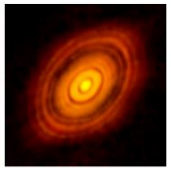
サブ課題A：惑星の起源の解明

（代表：東京工業大学 地球生命研究所 教授 井田 茂）

原始惑星系円盤の大域的な構造と進化、その環境下における微惑星集積、惑星へのガス集積、円盤との相互作用による軌道移動を融合した大規模計算を行い、一般的な惑星形成過程を明らかにし、「第二の地球」の存在確率や多様性の理論予測を行う。

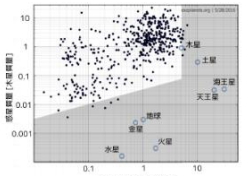


Tomida & Stone 2016



(c) ALMA (ESO/NAOJ/NRAO)

(c) ISAS/JAXA

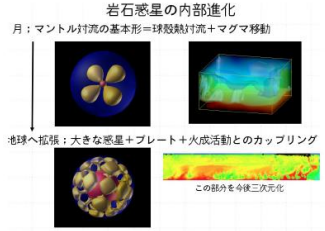


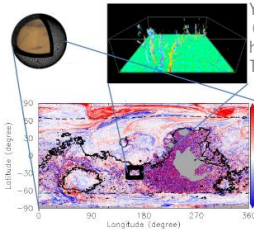
http://exoplanets.orgから改変

サブ課題B：惑星内部・表層のダイナミクスと進化

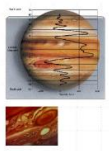
（代表：神戸大学 理学研究科 教授 林 祥介）

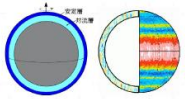
様々なサイズの惑星・衛星の、内部あるいは大気の力学的構造とその進化の探求を最終目標として、岩石惑星・衛星の火成活動・マントル対流、ガス惑星表層と深部の循環、火星全球ダストストームを中核対象に選び、球面・球殻形状での高解像度数値計算を実現、順次汎用化を進める。





Yanagisawa et al. 2016, Ogawa 2014, Furuichi et al. 2013
(c) NASA/HST, Nishizawa et al. 2016, Hayashi et al. 2015
http://staff.on.br/jlkm/astron2e/AT_MEDIA/CH11/CHAP11AT.HTM
Takehiro et al. 2015

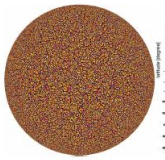




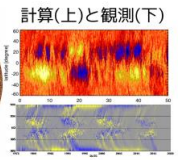
サブ課題C：太陽活動による地球環境変動の解明

（代表：名古屋大学 宇宙地球環境研究所 教授 草野 完也）

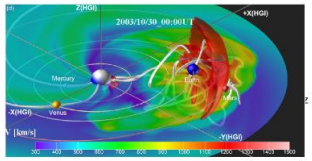
太陽磁場の起源である太陽対流層の第一原理的シミュレーションにより黒点、太陽活動の長期変動の起源を明らかにすると共に、さらに太陽磁場から太陽フレア、太陽風とコロナ質量放出が地球電磁気圏に与える影響を多階層シミュレーションにより統一的に明らかにする。太陽観測衛星、地球観測衛星等のデータと融合した解析により太陽地球惑星圏環境の短期・長期変動予測を行うことで、人工衛星・航空機・通信・電力などに対する太陽活動の社会影響を軽減するための技術開発を目指す。



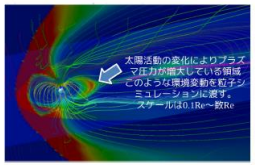
計算(上)と観測(下)



Hotta et al. 2015, 2016



Shiota & Kataoka 2016



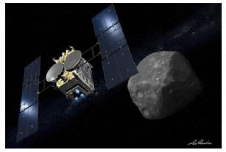
Fukazawa et al. 2014

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

（代表：筑波大学 計算科学研究センター 教授 梅村 雅之）

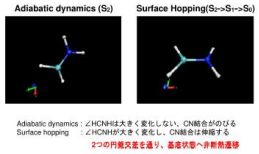
原始惑星系円盤の物質進化のシミュレーション，惑星間ダスト上の有機分子生成の量子化学計算を実施し，ALMA望遠鏡等による観測との直接比較や，“はやぶさ2”や“たんぽぽ計画”等による太陽系始原物質のデータとの突合せから，原始太陽系における物質進化を解き明かし，地球上の生命起源を探究する。

(c) ALMA (ESO/NAOJ/NRAO), R. Hills (ALMA)



(c) JAXA

(c) 東京薬科大学, JAXA



Shigeta et al. 2016

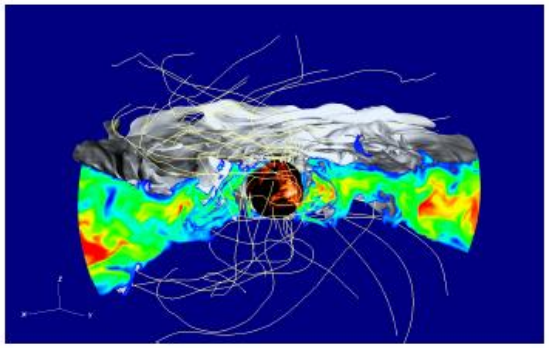
多くのサブ課題で問題自体が要求する空間スケール・時間スケールの幅が極めて大きい。これらに対応するため以下を基本的な方法論として進める。(a) 支配方程式の書き換えによる陽解法化、(b) ハミルトニアン分割等によるマルチスケール対応、(c) 時間方向ブロッキングによるメモリバンド幅・通信レイテンシ要求の緩和、(d) 以上を容易に実現可能にするフレームワーク・ドメイン特化言語をベースにしたソフトウェア開発。これらは将来的には重点課題・他の萌芽的課題の多くのアプリケーションに適用可能と考えている。

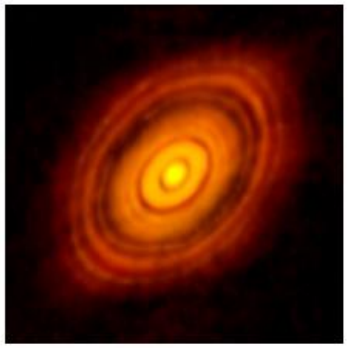
課題全体 概要

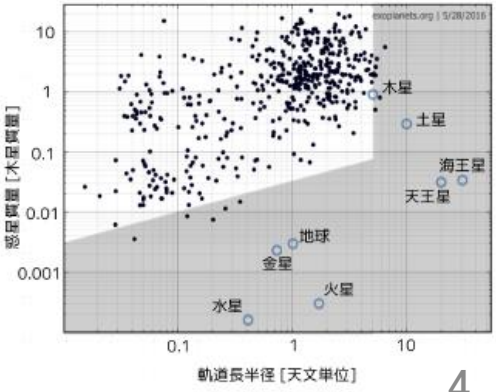
- 平成28年度の取り組み状況・成果について
  - 第21回 神戸大学長定例記者会見
    - 2016年9月16日 14:00- 於：神戸大学 本部
    - 「ポスト「京」萌芽的研究課題スタート --- 惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して」と題して記者発表を行った。（牧野）
    - http://www.kobe-u.ac.jp/info/usr/press/press_20160916.html
  - ポスト「京」萌芽的課題「惑星科学」キックオフワークショップ 開催
    - 2016年9月19日 13:00-18:30 於：神戸大学 惑星科学研究センター
    - 参加者29名（実体：27名、TV会議：2名）
    - 本課題研究を推進するにあたり達成すべきサイエンスの内容および技術的課題を共有・議論した。
  - ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第1回 公開シンポジウム 開催予定
    - 2017年3月6日開催予定
      於：神戸大学先端融合研究環統合研究拠点 コンベンションホール
    - 招待講演2件を含む15件の講演を予定。
    - https://www.cps-jp.org/~comps_pk/pub/2017-03-06/
  - 課題運営委員会を定期的に開催し進捗状況などを確認・議論している
    - 過去4回開催（2016年8月1日、10月12日、12月19日、2017年2月14日）

サブ課題A：惑星の起源の解明

- 概要
  - 原始惑星系円盤の大域的な構造と進化、その環境下における微惑星集積、惑星へのガス集積、円盤との相互作用による軌道移動を融合した大規模計算を行い、一般的な惑星形成過程を明らかにし、「第二の地球」の存在確率や多様性の理論予測を行う。
- ポスト京での目標
  - 非理想MHD効果や円盤ガスの電離度の進化まで考慮した、ガス円盤の大域的高解像度シミュレーションにより、惑星形成の初期過程を明らかにする。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で、惑星形成過程の全体を解明する。
- 計算サイズ・必要資源
  - 惑星形成では10億粒子、10万年、30モデル。ポスト「京」1週間(全系までスケールはしない)



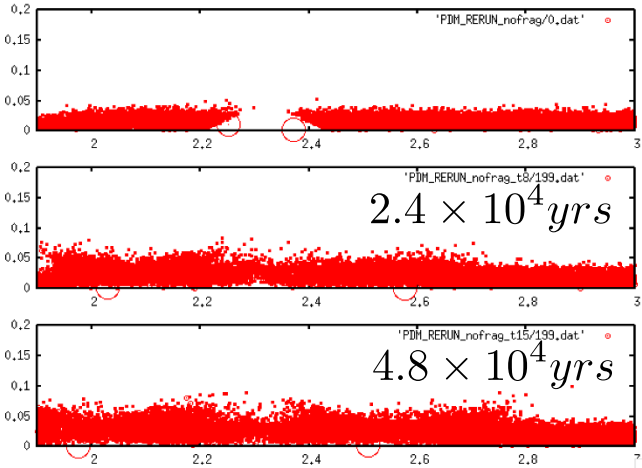




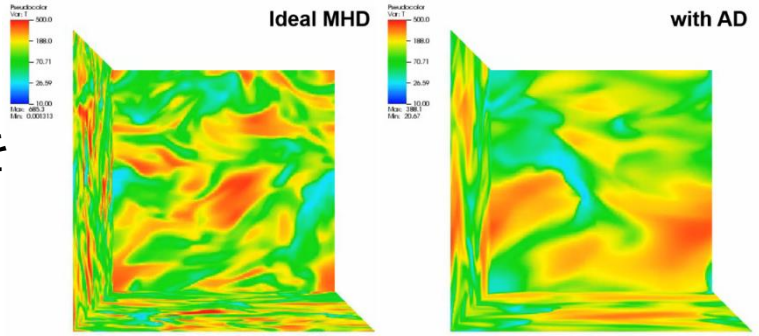
サブ課題A：惑星の起源の解明

平成28年度の取り組み状況・成果について

- 東京工業大学
  - 小南 淳子 研究員 着任（2016年8月）
    - 惑星集積シミュレーション担当。
  - 衝突破壊モデルをN体計算コードに実装。
    - 破壊小天体との相互作用により原始惑星が外側に移動していくことを明らかにした。
    - ガス円盤の影響による、惑星が中心星に落下する問題を解決する可能性



- 大阪大学
  - 富田 賢吾（分担者）
    Athena++コードでの磁気流体シミュレーション担当。
  - 非理想MHD効果（オーム散逸・双極性拡散）を実装。
  - Athena++コードをWebで公開
    - http://princetonuniversity.github.io/athena/
  - 国立天文台CfCAの協力のもとAthena++講習会を実施予定。（2017年2月18日-21日）



サブ課題A：惑星の起源の解明

平成29年度の実施計画

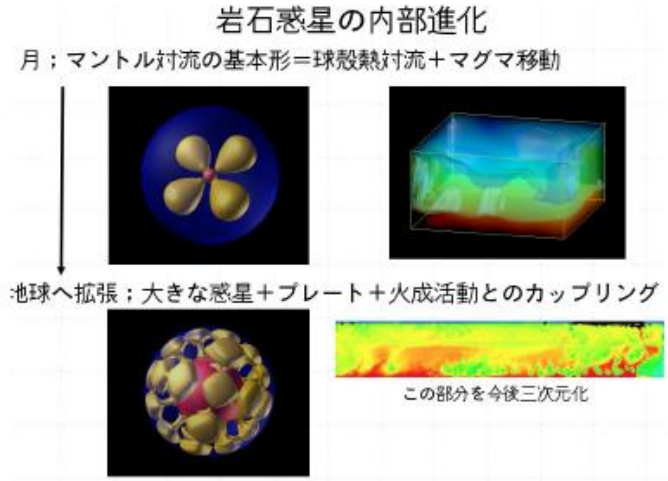
- 東京工業大学
  - 「京」での惑星集積N体シミュレーションの成果を踏まえて、「京」で目指す惑星集積過程における具体的科学目標を設定した上で、開発した最適化されたコードにより、試験的なシミュレーションを開始する。

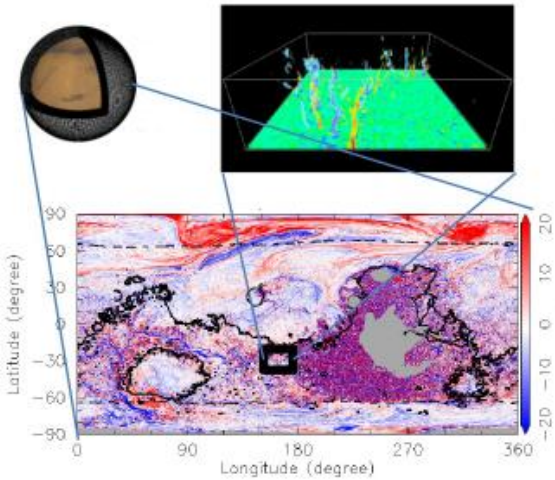
- 大阪大学
  - 惑星形成の初期条件・境界条件となる原始惑星系円盤の形成及び進化の大規模磁気流体シミュレーションを行う。平成28年度に開発したAthena++コードを用い、非理想MHD効果のうちオーム散逸と双極性拡散を取り入れた大域的磁気流体シミュレーションにより、原始惑星系円盤の各領域における非理想MHD効果の働きと磁気回転不安定性などによって励起される乱流、及び円盤から駆動されるアウトフローの性質を調べる。
  - 2017年4月1日から特任助教1名を雇用予定。

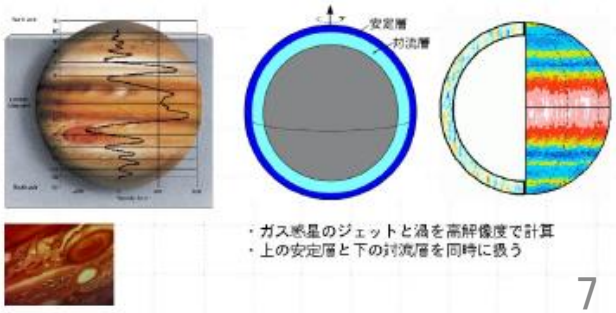
- 理化学研究所AICS
  - 大域的N体シミュレーションの開発・最適化を東京工業大学と協力して進める。

サブ課題B：惑星内部・表層のダイナミクスと進化

- 概要
  - 様々なサイズの惑星・衛星の、内部あるいは大気の力学的構造とその進化の探求を最終目標として、岩石惑星・衛星の火成活動・マントル対流、ガス惑星表層と深部の循環、火星全球ダストストームを中核対象に選び、球面・球殻形状での高解像度数値計算を実現、順次汎用化を進める。
- ポスト京での目標
  - マントル対流: 月の45億年3次元。さらに地球、スーパーアースに。惑星大気:火星で水平解像度800m、鉛直200層で表現、60火星日間(約1/12火星年)。火星のダストストーム、さらに金星の全球計算を目指す。ガス惑星:水平解像度0.2度、鉛直128層、10万惑星日。
- 計算サイズ・必要資源
  - サイズは上記。火星大気で4ケース計算、ポスト「京」で1週間。







サブ課題B：惑星内部・表層のダイナミクスと進化

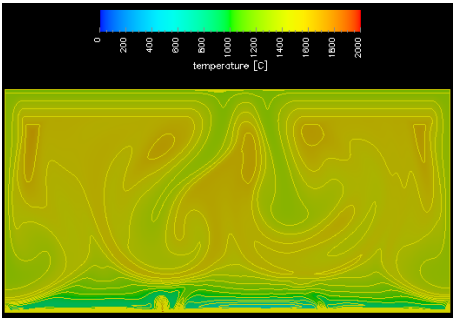
平成28年度の取り組み状況・成果について（1）

- 樫村 博基 特命助教 着任（2016年10月・神戸大）
  - 大規模シミュレーションの遂行と結果の解析を担当。

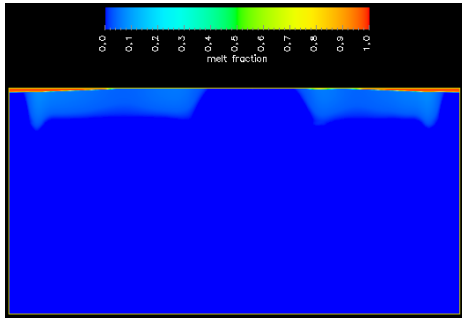
- マントル対流
  - 岩石惑星の内部進化を支配する3次元火成活動･マントル対流結合系の数値モデルを構築・計算している。
    - 対流しつつある3次元マントルに於けるマグマの生成･移動、そのマントル対流に与える反作用、特に地球のマントル対流を理解する上で重要なテクトニックプレートのシミュレーションに成功した。

火成活動のモデル

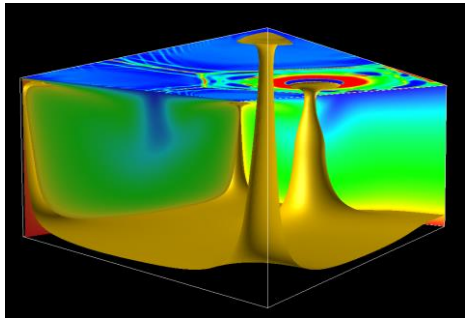
温度分布



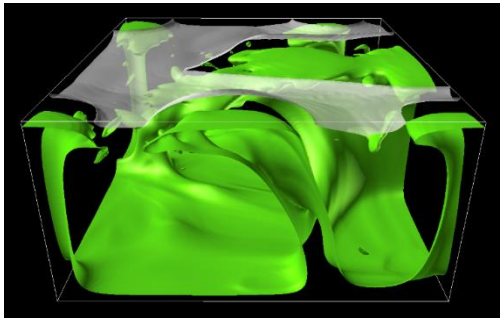
マグマ分布



テクトニック
プレートのモデル



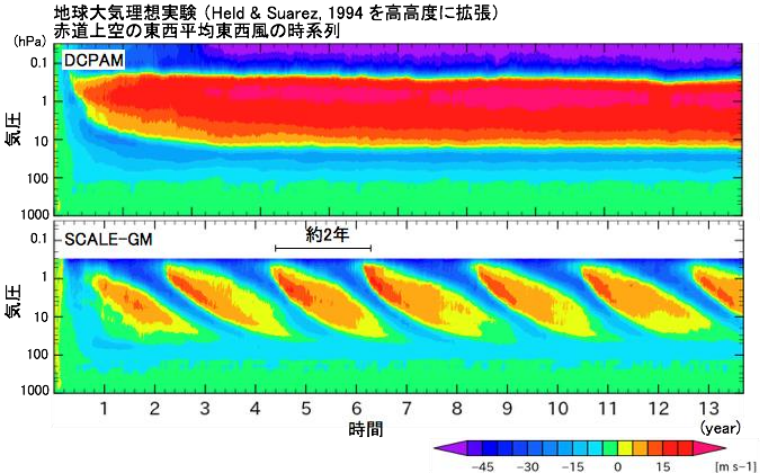
対流している
マントル中の液相分離



サブ課題B：惑星内部・表層のダイナミクスと進化

平成28年度の取り組み状況・成果について（2）

- 惑星大気
  - 従来の静力学スペクトルモデル（DCPAM）から、「京」・ポスト「京」に適した非静力学正二十面体モデル（SCALE-GM）へと、数値実験の設定・ 結果・知見を切れ目なく繋げていくための基礎実験として、地球大気の理想実験（Held & Suarez, 1994）を両モデルで実施した。
    - この結果を踏まえて、高高度における渦粘性の影響の度合いなどを検証する。
  - さらに火星大気の理想実験（Mischna & Wilson, 2006）を両モデルで実施するためのコード開発・実装・計算に取り掛かった。



- ガス惑星
  - 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用スペクトル法ライブラリを「京」に導入し、ベンチマーク計算を実施した。
    - その結果、並列計算のスケーリングは良好であることが分かった。（コア数 8 倍で並列加速率 4.5 倍）
    - さらに計算速度を伸ばすためには基本ルーチンのチューニングが必要であることが分かった。

サブ課題B：惑星内部・表層のダイナミクスと進化

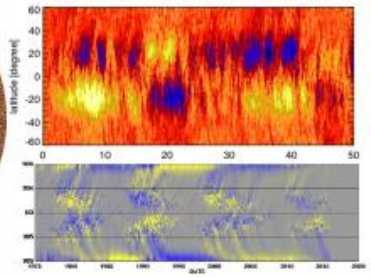
平成29年度の実施計画

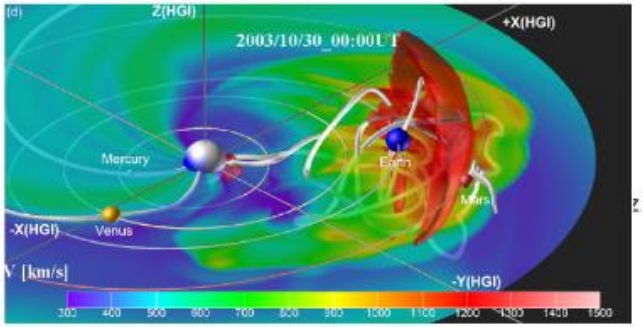
- 神戸大学
  - 三つの球対流研究テーマ「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」、「岩石惑星の火成活動～マントル対流系の三次元球殻モデリング」、「ガス惑星の全球気象学～深部対流から表層ジェット流まで」間の情報共有を図り、それぞれのモデル（岩石惑星モデル、惑星大気モデル、ガス惑星モデル）で必要となる基礎ルーチンの開発を進め、「京」上での大規模計算の実装実験を実施する。
  - 特に「地球型惑星の気象・気候～火星全球ダストストーム」に関しては、「京」での火星大気設定での力学計算を実現し、順次火星物理過程を改良導入して、その火星気象計算の実現を図る。
- 東京大学
  - 平成28年度に開発した対流運動シミュレーションプログラムを用いて、火成活動（マグマの生成と移動）とマントル対流のカップリングおよびテクトニック・プレートのより現実的な3次元シミュレーションを実行する。
  - 特に実際の地球で見られる、洪水玄武岩生成などのパルス的な大規模火成活動や安定したプレート運動の再現を目指す。
- 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スペクトル法のライブラリをメニーコアマシンに導入し、ベンチマーク計算を行いつつ問題点を抽出する。

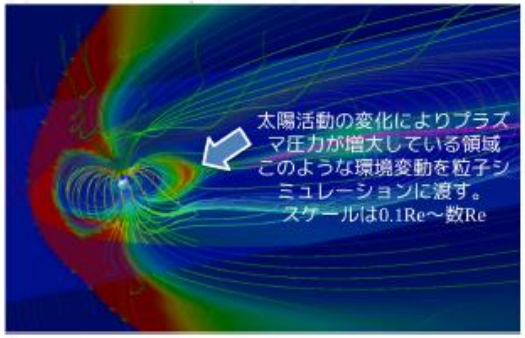
サブ課題C：太陽活動による地球環境変動の解明

- 概要
  - 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し、太陽活動の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明らかにする。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短期・長期予測手法を確立し、太陽活動の社会への影響の軽減を目指す。
- ポスト京での目標
  - 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。
- 計算サイズ・必要資源
  - 2000×20000×40000 の格子点を導入し、太陽活動を20年分計算する。ポスト京の全ノード30日である。

計算(上)と観測(下)







サブ課題C：太陽活動による地球環境変動の解明

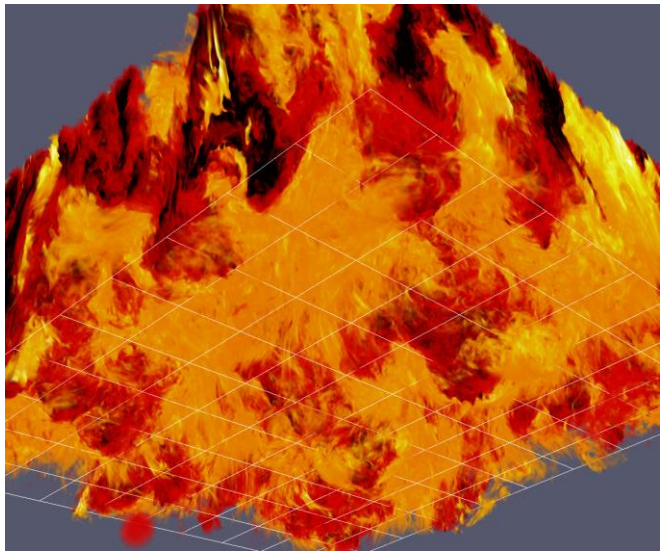
平成28年度の取り組み状況・成果について

- 井上 諭 特任助教 着任（2017年1月・名古屋大）
  - 太陽モデルの開発を担当。

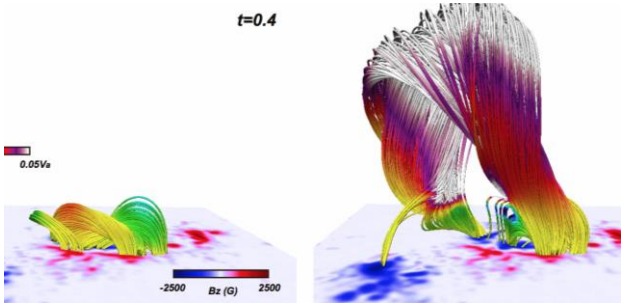
- 太陽対流層境界の最精密シミュレーション
  - 太陽黒点活動の機構を解明するために最も重要であると考えられている放射層と対流層の境界について、世界で最も現実に近い精密計算の実現に成功し、これまでに知られていない薄い遷移層が形成されることを発見した。

- 太陽フレア爆発のデータ駆動型シミュレーション
  - 太陽表面磁場の衛星観測データを境界条件として用いた太陽フレア爆発の精密シミュレーションを実施し、現実の太陽面爆発の再現に成功。

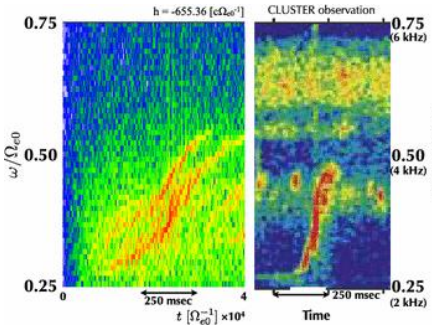
- 地球磁気圏の多スケールシミュレーション
  - エクサフロップス級計算環境で高並列化を維持する新しい並列化モデルの開発
  - これまで困難であった現実のパラメータでのミクロスケール内部磁気圏シミュレーションの開発



太陽放射層対流層境界の超精密シミュレーション

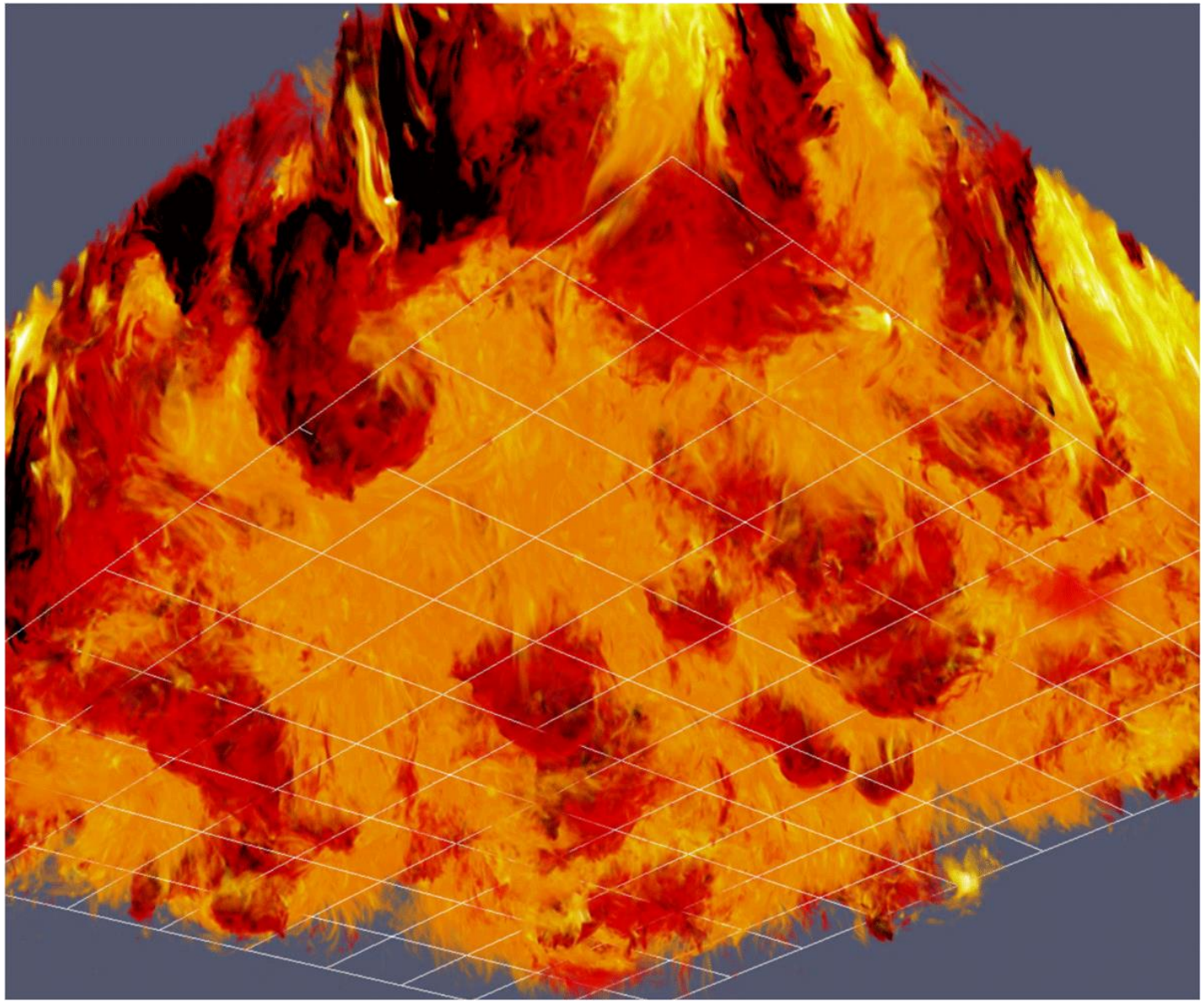


太陽フレア爆発のデータ駆動型シミュレーション



現実の地球磁気圏での磁場構造とプラズマ環境を用いた電磁放射のミクロスケールシミュレーション [Katoh and Omura, 2016]

太陽放射層対流層境界の超精密シミュレーション



動画提供：堀田英之（千葉大学大学院理学研究科）

サブ課題C：太陽活動による地球環境変動の解明

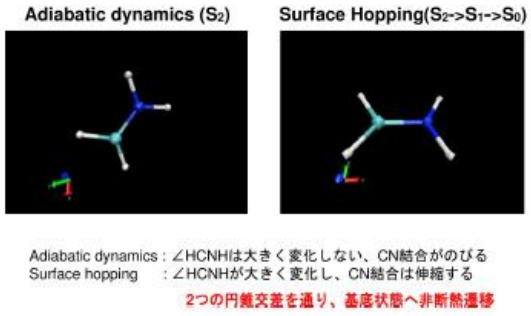
平成29年度の実施計画

- 名古屋大学
  - 「京」及び名古屋大学「FX100」を使って、太陽活動領域、太陽風、磁気圏、衛星環境モデルの初期実験を継続する。その計算結果の解析から、太陽フレアの発生とその地球環境影響を探るために必要な新たなシミュレーションモデルの開発要素を明確化する。

- 千葉大学
  - 「京」及び名古屋大学「FX100」を使って、太陽対流層を包括した磁気流体計算を実施するとともに、より高解像度の状況を理解するために領域を制限した計算を行う。

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

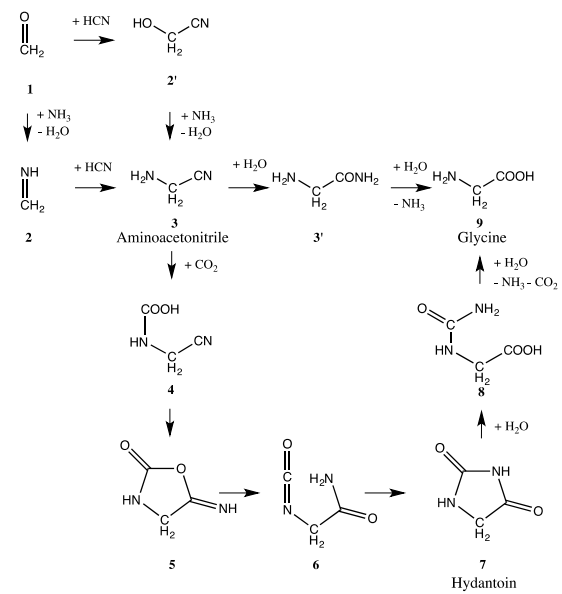
- 概要
  - 原始惑星系円盤、惑星間ダスト上の有機分子生成の量子化学計算を実施し，ALMA望遠鏡、はやぶさ2 やたんぽぽ計画等のデータとの突合せから，原始太陽系における物質進化を解き明かし，地球上の生命起源を探究する。
- ポスト京での目標
  - 原始太陽系における有機分子生成の第一原理計算を世界に先駆けて実現する。観測データとの比較により太陽系における生命の起源の解明に迫る。
- 計算サイズ・必要資源
  - Surface Hopping 法を用いてアミノ酸の励起状態遷移量子ダイナミックスをシミュレーションする。アラニン分子で30状態間の励起状態分岐、1つの分岐に対して100トラジェクトリ、初期の基底状態構造を30セット程度、1パスの計算に10時間・10Tflop。 総計ポスト「京」で4日程度。

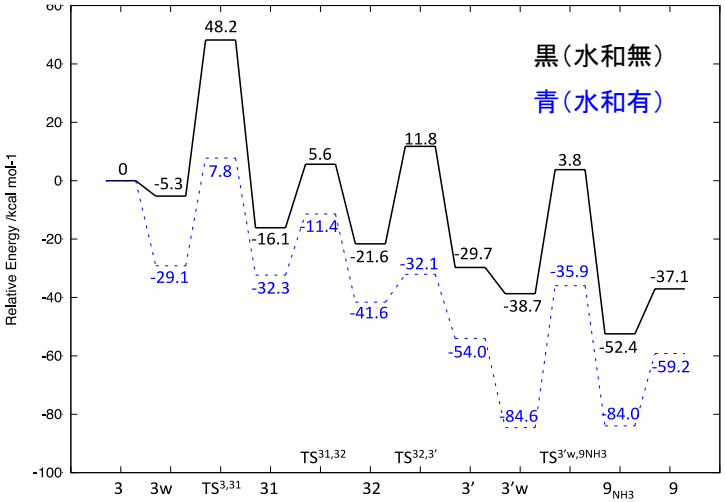


サブ課題D：原始太陽系における物質進化と生命起源の探究

平成28年度の取り組み状況・成果について

- 栢沼 愛 助教 着任（2016年12月・筑波大）
  - 星間分子の合成経路に関する研究を担当。
- L型アミノ酸（アラニン、バリン、イソバリン、セリン）の光吸収特性についての理論解析
- ラジカル反応でのアミノ酸（グリシン）生成機構についての理論解析（右図）
- 非ラジカル反応でのアミノ酸生成過程と水和効果についての理論解析
- 第一原理分子動力学シミュレーションのプログラム開発
  - 実空間密度汎関数法に基づくCar-Parrinello分子動力学法の開発を行い、「京」で1千原子超の第一原理シミュレーションを実行
  - 平面波密度汎関数法に基づくCar-Parrinello分子動力学法の「京」でのチューニング





グリシン生成経路と
反応エネルギープロファイル

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29年度の実施計画

- 筑波大学
  - 「京」とCOMA, Oakforest-PACSを用いた大規模な第一原理分子動力学計算に向けたコード整備と予備計算を行う。また、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を進める。ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析に向けて、「京」とCOMA, Oakforest-PACSを用いた基底状態量子化学計算を行う。

- 名古屋大学大学院工学研究科の分担機関への追加を申請したい。【新規】
  - 分担機関代表：石原 卓 准教授、他 業務協力者3名を予定。
  - これまでサブ課題Dの参加者とは宇宙乱流の分野で共同研究を進めてきている。乱流中でのダスト形成・成長などが深く関連するため、本課題に参画して頂き、当該研究の推進を図りたい。
  - 特に平成29年度は、原始太陽系におけるダスト成長過程の解明に向け、「京」とCOMA, Oakforest-PACS及び名古屋大学「FX100」を用いて、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のためのコード開発を進める。予備計算とデータ解析を行い、大規模な第一原理数値シミュレーションにおける具体的な問題設定を行う。
  - 予算規模：2,600千円（サブ課題Dの中で調整・配分する）

本事業を推進する上で実施機関の観点から萌芽的サブWGで議論して頂きたい議題

- 萌芽的課題全体の計算資源量について
  - 配分されている「京」の計算資源がきわめて限定的であり、研究遂行に支障がある。
  - 上期・下期に分けて運用しなければならず、円滑な研究の推進に対して大きな障害となっている。
- これらについて、「京」の十分な計算資源の配分および弾力的な運用を強く要望します。

新しい計算アルゴリズムの開発と サブ課題間の連携

- P^3T法 (Particle-particle Particle-tree, Oshino et al. 2011)
  - 遠距離力はツリー法+一定時間刻み、近距離力は直接計算+独立可変時間刻みで行うことで、低い計算コストで高精度に時間積分を行うことができる。
  - これにFDPS(後述)を適用することで、大規模並列化が可能になる。
  - サブ課題Aでは、惑星集積過程の解明に向けて、これを用いた多体シミュレーションを進めている。

- 音速抑制法 (Hotta et al. 2012)
  - 音速より遅い流れを、圧縮性スキームを使うことで計算効率を上げる。
  - CFL(Courant-Friedrichs-Lewy)条件を緩和するため、実効的に「音速を遅く」する。
  - サブ課題Cでは、開発した音速抑制法を太陽対流層全球計算に適用し、世界最高解像度の数値シミュレーションを実現した。太陽ダイナモ問題の解明を目指す。
  - サブ課題Bにおいても、音速抑制法を惑星大気計算やマントル対流のシミュレーションへの応用を検討中。

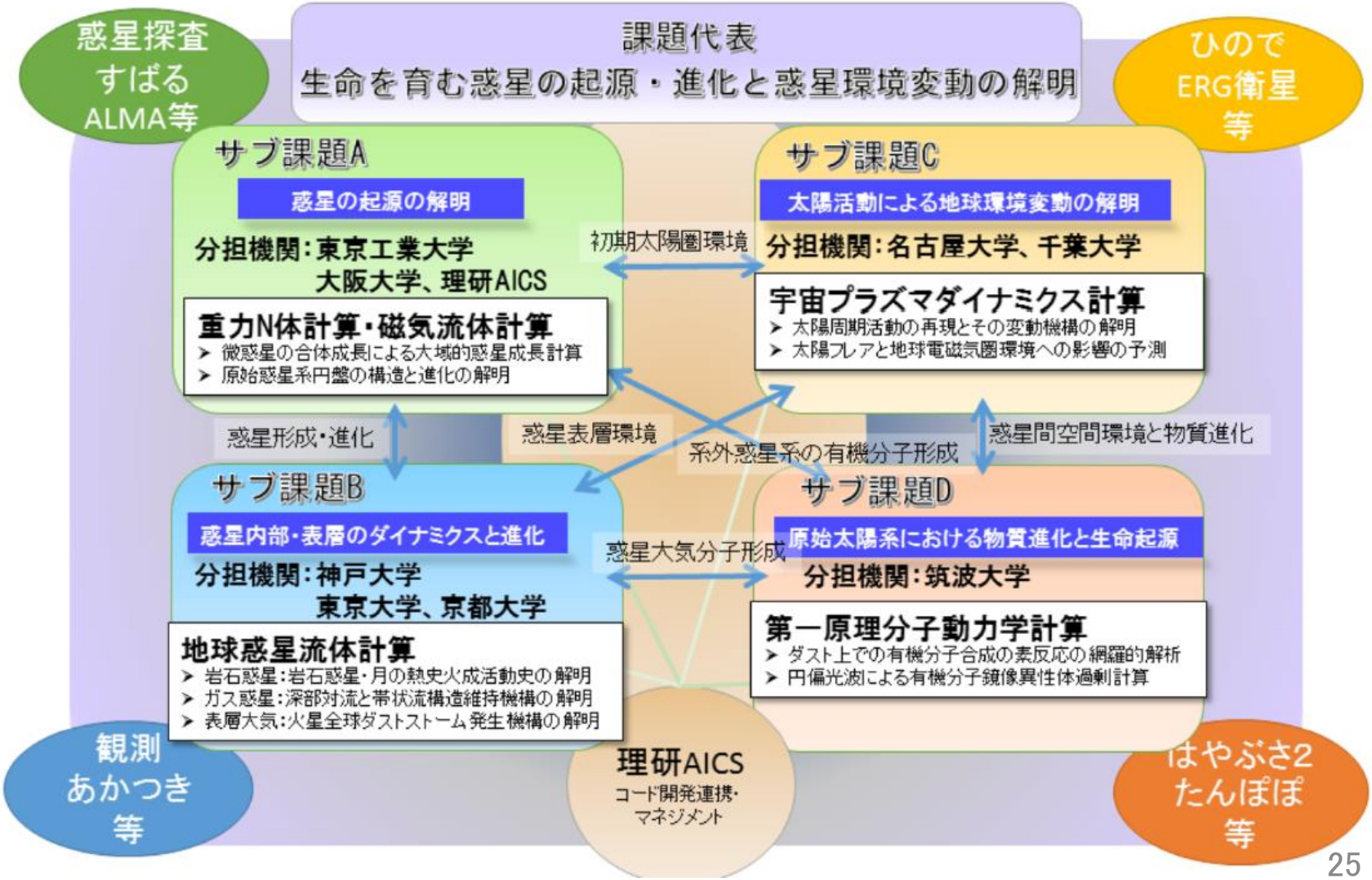
新しい計算アルゴリズムの開発とサブ課題間の連携

- 大規模並列化・チューニングにむけて
  - フレームワークの活用（理研AICSで開発）
  - FDPS (Framework for Developing Particle Simulator)
    - https://github.com/FDPS/FDPS/
    - 粒子系シミュレーションのための汎用プラットフォーム
  - Formura
    - https://github.com/nushio3/formura
    - 差分法向けのドメイン特化言語 (DSL)

```
dimension :: 3
axes :: x, y, z

ddx = for(a) (a[i+1/2,j,k] - a[i-1/2,j,k])/2
ddy = for(a) (a[i,j+1/2,k] - a[i,j-1/2,k])/2
ddz = for(a) (a[i,j,k+1/2] - a[i,j,k-1/2])/2

∂ = (ddx,ddy,ddz)

Σ = for (e) e(0) + e(1) + e(2)

begin function init() returns dens_init
    float [] :: dens_init = 0
end function

begin function dens_next = step(dens)
  float :: Dx, Dt
  Dx = 4.2
  Dt = 0.1
  dens_next = dens + Dt / Dx**2 * Σ for(i) (∂ i . ∂ i) dens
end function
```

Formuraの例

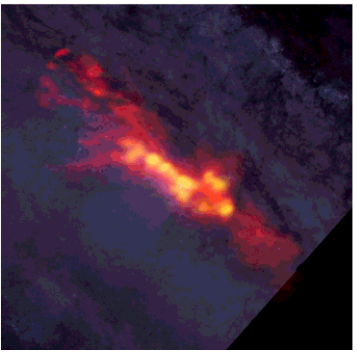
実施体制

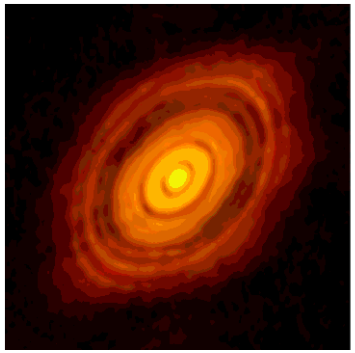

惑星探査
すばる
ALMA等
課題代表
生命を育む惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明
ひので
ERG衛星
等
サブ課題A
惑星の起源の解明
分担機関：東京工業大学
大阪大学、理研AICS
重力N体計算・磁気流体計算
➢ 微惑星の合体成長による大域的惑星成長計算
➢ 原始惑星系円盤の構造と進化の解明
初期太陽圏環境
サブ課題C
太陽活動による地球環境変動の解明
分担機関：名古屋大学、千葉大学
宇宙プラズマダイナミクス計算
➢ 太陽周期活動の再現とその変動機構の解明
➢ 太陽フレアと地球電磁気圏環境への影響の予測
惑星形成・進化
惑星表層環境
系外惑星系の有機分子形成
惑星間空間環境と物質進化
サブ課題B
惑星内部・表層のダイナミクスと進化
分担機関：神戸大学
東京大学、京都大学
地球惑星流体計算
➢ 岩石惑星：岩石惑星・月の熱史火成活動史の解明
➢ ガス惑星：深部対流と帯状流構造維持機構の解明
➢ 表層大気：火星全球ダストストーム発生機構の解明
惑星大気分子形成
サブ課題D
原始太陽系における物質進化と生命起源
分担機関：筑波大学
第一原理分子動力学計算
➢ ダスト上での有機分子合成の素反応の網羅的解析
➢ 円偏光波による有機分子鏡像異性体過剰計算
観測
あかつき
等
理研AICS
コード開発連携・
マネジメント
はやぶさ2
たんぽぽ
等

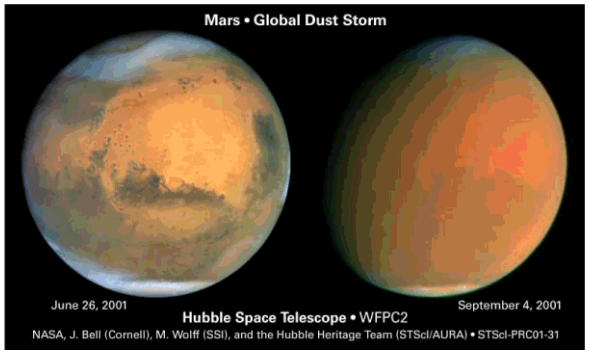
参考資料

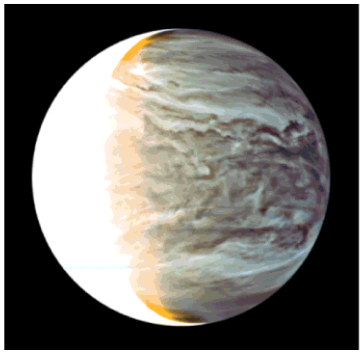
課題全体 概要

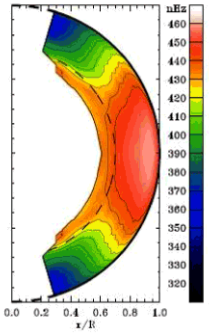
- 目的
  - 太陽のような星とそれが持つ惑星系の起源から形成された惑星の構造の進化、大気や表面の水圏の形成・進化、太陽活動の変化やその惑星表層への影響といった、実験では実現不可能な現象を大規模計算によるシミュレーションを使って研究し、国内外で進められている様々な観測・探査プロジェクトと連携して、惑星の起源・進化と惑星環境変動の解明を目指す。
- 準備フェーズ
  - 科学目標の詳細化、ポスト「京」を想定した計算コード・基礎ルーチンの開発
- 本格フェーズ
  - ポストT2K 等を用いた大規模計算による科学目標の達成・ポスト「京」を想定した最適化の完了











観測・実験との連携

- サブ課題A
  - Kepler 等による系外惑星の観測、ALMA による星形成・原始惑星系円盤の観測の説明が重要テーマ。(東工大ELSI)
- サブ課題B
  - 月・火星・地球のマントル対流の進化史の解明、現在の観測との比較、ガス惑星の構造、火星・金星大気の観測との比較。将来の惑星探査への提言。(神戸大学CPS)
- サブ課題C
  - ひのでによる詳細観測データに基づいたフレア再現シミュレーションを行う。長期的にはデータに基づく「予報」を目指す。(名大ISEE)
- サブ課題D
  - ALMAでの星形成領域、原始惑星系星雲での有機分子直接観測や、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比較を行う。(筑波大CCS)