

平成 28 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 28 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

平成 29 年 5 月 27 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28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 28 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）	4
4-2-1. サブ課題 A 「惑星の起源の解明」	4
4-2-2. サブ課題 B 「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」	8
4-2-3. サブ課題 C 「太陽活動による地球環境変動の解明」	12
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」	17
4-3. 活動（研究会等）	21
4-4. 実施体制	22

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 1-1				
	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（54 歳）		
		氏名	牧野 淳一郎	月日	※2017 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
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 28 年度（報告年度）の実施内容

4-1. 実施計画

萌芽的課題に関する研究開発要素について以下を目標とし研究開発を推進する。

①サブ課題A「惑星の起源の解明」

平成28年度は、調査研究・準備研究フェーズとして、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、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 計算科学研究機構と共同で開始す

る。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、本格実施フェーズに向けた準備（実施体制構築の着手、研究等）を進める。

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。

- ・ポスト「京」で目指す具体的科学目標を設定し、惑星集積シミュレーションのために最適化されたコードを開発する。
- ・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ための磁気流体シミュレーションコードの開発を行う。
- ・大域的N体シミュレーションの開発・最適化を進める。

②サブ課題B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」

平成28年度は、調査研究・準備研究フェーズとして、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、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開始する。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、本格実施フェーズに向けた準備（実施体制構築の着手、研究等）を進める。

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。

- ・「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」という三つの球対流研究テーマについて、各テーマ間の情報共有体制を確立し、各テーマソフトウェアの「京」での実装を促す。
- ・固相マントルの対流運動シミュレーションプログラムを「京」に導入し、そのベンチマークを行う。より現実的なシミュレーションを目的としたプログラムの開発を行う。
- ・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ライブラリを「京」に導入し、ベンチマークを行う。また火星の全球大気循環を高空間解像度で計算するためのモデルの開発を進める。

③サブ課題C「太陽活動による地球環境変動の解明」

平成28年度は、調査研究・準備研究フェーズとして、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、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開始する。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、本格実施フェーズに向けた準備（実施体制構築の着手、研究等）を進める。

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。

- ・「京」を使って太陽対流層モデルの計算を行う。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。
- ・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包括的な計算を行う。

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28年度は、調査研究・準備研究フェーズとして、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、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）の詳細の策定を分担機関の国立大学法人筑波大学と共同で開始する。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、本格実施フェーズに向けた準備（実施体制構築の着手、研究等）を進める。

星間有機分子生成の大規模な第一原理分子動力学計算に向けた研究計画を策定し、実施体制を構築する。

また、分担機関と連携し、再委託によって、以下の⑤～⑭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)
研究体制構築をすすめ、「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」で目指す具体的科学目標を設定した上で、最適化されたコードを開発する。
- 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)
サブ課題Aの一環として、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ために必要となる磁気流体シミュレーションコードの開発を行う。
- 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 計算科学研究機構)
サブ課題Aにおける、大域的N体シミュレーションの開発・最適化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
研究体制の構築を行い、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」間の情報共有体制を確立し、各テーマソフトウェアの「京」での実装を促す。また、「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、火星大気用の物理過程を導入し、火星の全球大気の循環を高空間解像度で計算するためのモデルの開発を進める。
- 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)
サブ課題Bで、火成活動・マントル対流結合系シミュレーションの土台となる固相マントルの対流運動シミュレーションプログラムを「京」に導入し、そのベンチマーク計算および性能の評価を行う。さらに火成活動(マグマの生成と移動)に重点を置き、より現実的なシミュレーションを目的としたプログラムの開発を行う。
- 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スペクトル法のライブラリを「京」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。
- 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)
「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。
- 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)
サブ課題Cで、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の包括的な計算を行う。
- 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」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。

⑭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28年度において、サブ課題A「惑星の起源の解明」では、衝突破壊モデルのN体計算コードへの実装、非理想MHD効果のシミュレーションコードへの実装、Athena++コードの開発と公開を行った。サブ課題B「惑星内部・表層のダイナミクスと進化」では、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、「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、初期データを整備した。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、非ラジカル反応でのアミノ酸生成経路の解析を行うとともに、フラグメント分子軌道法の開発およびメニューコア・アーキテクチャへの実装を行った。

サブ課題間の連携のために、本課題ではキックオフワークショップ(平成28年9月)、公開シンポジウム(平成29年3月)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で開催している。技術的課題に関しては理研AICS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。

4-2-1. サブ課題A「惑星の起源の解明」

平成28年度において、サブ課題Aでは研究体制構築を進めながら、観測データの精査および星・惑星形成過程の現状の理解の上で、「京」での成果を踏まえて、ポスト「京」で目指す具体的な科学目標の設定を行った(4-1. 実施計画①⑤⑥⑦に対応)。

東京工業大学では、惑星集積シミュレーションについて衝突破壊モデルをN体計算コードに実装した。N体計算の解像度を上げることで暴走的に成長した惑星が周囲の微惑星の重力的散乱により、動径方向に移動することがわかった。円盤ガスとの重力相互作用による内側への惑星軌道移動の効果も入れて計算した。完全合体のもとでは、内側への惑星移動が微惑星散乱による外側移動より強いことがわかった。しかし、微惑星間の衝突破壊を考慮すると外側移動が勝ち、惑星が生き残る可能性があることがわかった(図1)。

大阪大学では主に以下の4つを実施した。

- ・ 非理想 MHD 効果の実装

原始惑星系円盤は高密度かつ低温のため電離度が低く、磁場とガスが完全に凍結した理想 MHD 近似は破綻し、磁場の散逸が起こる。この非理想 MHD 効果をシミュレーションコードに実装した(図 2)。テスト計算を行い今後の計算に必要な性能を有していることを確認した。

- ・ Athena++コードの公開

本研究に使用している Athena++コードは米国 Princeton 大学と共同で開発している公開コードである。公開に当たりコードの整理とドキュメントの整備を行った。以下の Web ページにおいてコードを公開した。

<http://princetonuniversity.github.io/athena/> (英語)

<http://vega.ess.sci.osaka-u.ac.jp/~tomida/athena/> (日本語)

国立天文台天文シミュレーションプロジェクトの協力を得て、本コードを教材とした数値磁気流体シミュレーションの講習会を開催し、講師として講義・実習を担当した(2017年2月18日-21日、国立天文台三鷹、参加者40名)。

- ・ 星周円盤計算の初期条件の構築及びテスト計算

本研究を実施するにあたり、星周円盤の構造を長時間計算できる安定な初期条件および境界条件の設定が不可欠である。初期条件として可能な限り自然な状況を構築し、テスト計算を行い本研究で目指す長時間の安定な計算が可能であることを示した。

- ・ Xeon Phi への対応

Intel 社の新型のプロセッサ Xeon Phi (Knights Landing)は日本でも Oakforest に導入され、今後の大型計算機において重要となることが考えられる。そこで Athena++コードの Xeon Phi への対応を行い、通常の CPU と比較して1コア当たり70%以上、1ノードの Xeon Phi で通常の CPU2ノード分に相当する十分に高い性能が得られることを確認した。

理化学研究所では、惑星形成向け大域的 N 体シミュレーションコードの開発・最適化を東京工業大学と協力して進めた。具体的には、AICS 粒子法シミュレータ研究チームで開発している大規模並列粒子法シミュレーションコード開発フレームワーク FDPS (Framework for Developing Particle Simulator)を使い、惑星形成向け大域的 N 体シミュレーションコードに必要な独立時間刻みを可能にする P³T (particle-particle particle-tree) 法の大規模並列実装・性能評価を進めた。P³T 法の分散メモリ型計算機での大規模並列実装においては、シリアル実行によるボトルネックを作らないこと、通信ボトルネックも作らないことが重要になる。ツリー部分は十分に並列化されるが、短距離力を独立時間刻みで実行する部分の並列性を有効に使うのは困難である。これは、短距離力で相互作用する粒子が複数ノードに分散している場合に対応する必要があるためである。単純な対応では、そのような粒子をすべてランク 0 のプロセスで時間積分するが、これでは粒子数・プロセス数が多い場合に対応できない。このため、短距離相互作用の相手がある粒子を独立な連結集合に分離し、それぞれを適切なプロセスに割り当てることで並列度を上げるアルゴリズムを定式化した。平成 29 年度には実装・性能評価を進める。

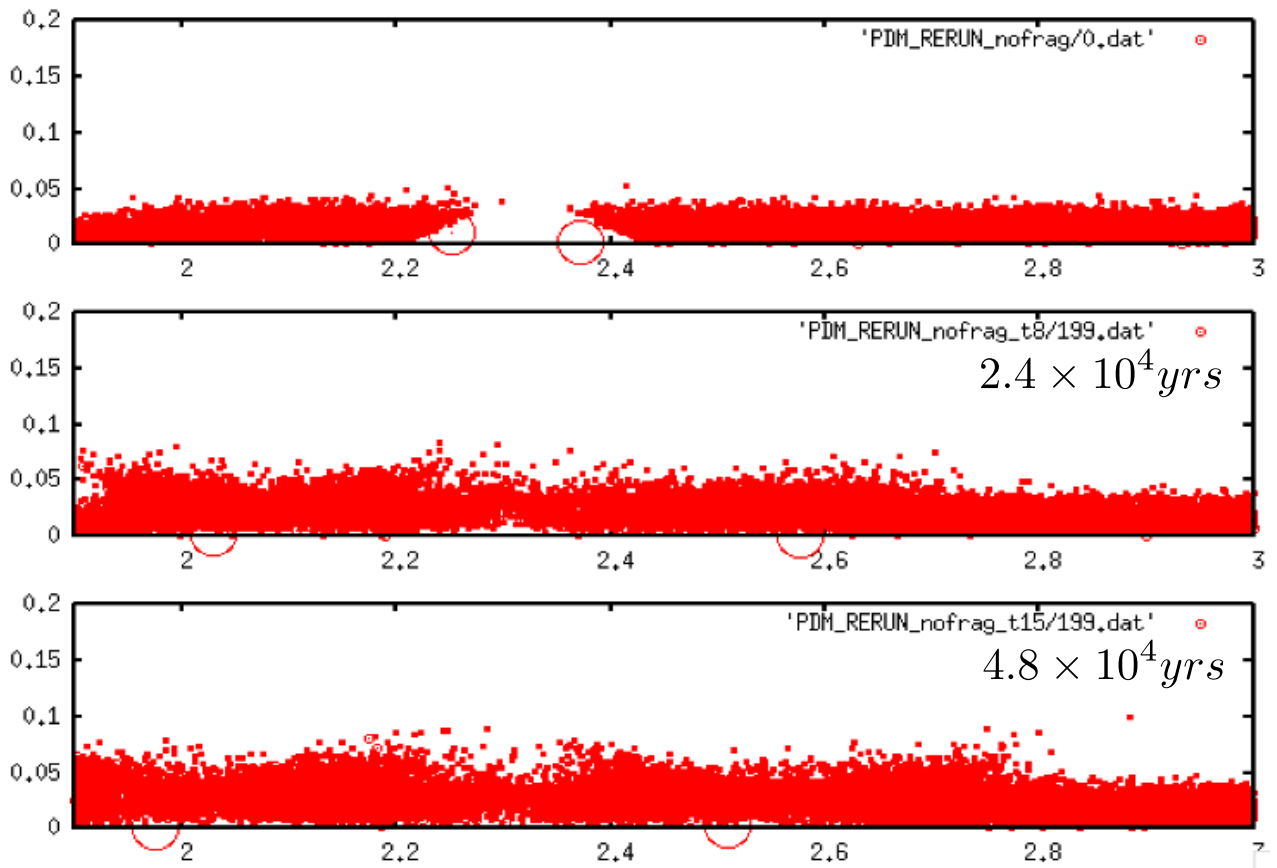


図1：微惑星集団の中に原始惑星を2つおいた場合のN体計算。縦軸は軌道離心率で、横軸は軌道半径（単位は天文単位）。原始惑星は微惑星を散乱しながら広がっていく。

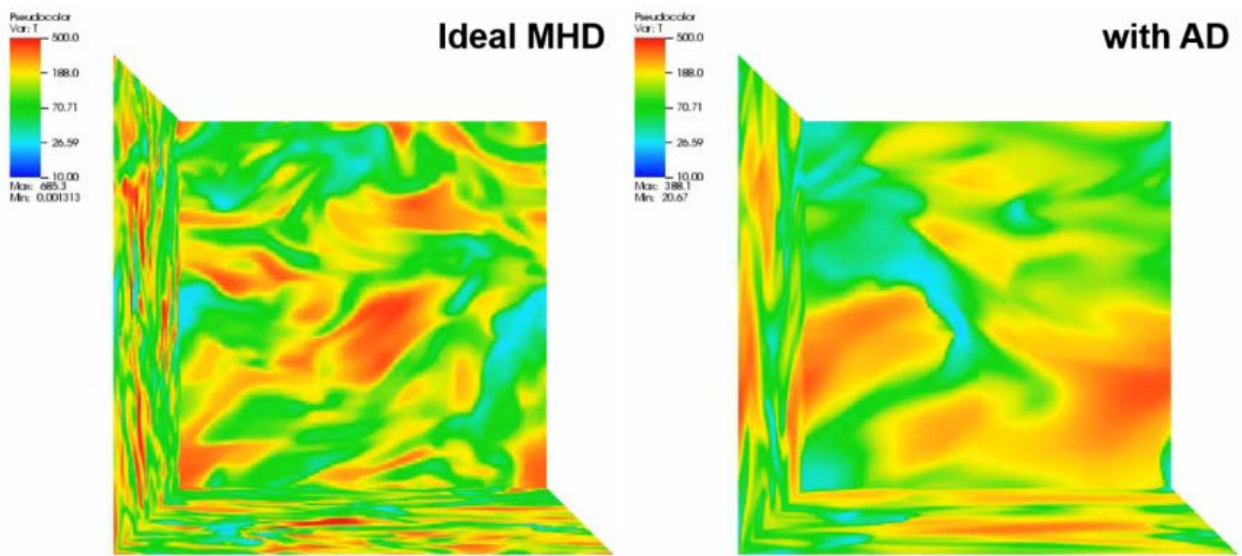


図 2 : Athena++コードに非理想MHD 効果(オーム散逸・両極性拡散)を実装し、テスト計算を行った。両極性拡散を入れると、ガス乱流が抑えられる。

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28年度において、サブ課題Bでは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、マントルモデルおよび大気モデルの改良開発と必要となる基礎ルーチンの開発、実装実験の検証と最適化検討を行った(4-1. 実施計画②⑧⑨⑩に対応)。

惑星内部・表層のダイナミクスと進化の考察に必須となる、球面上あるいは球殻中での惑星流体高分解能大規模流体計算の可能性を探求し、得られた数値的表現とその理解を得ることに着手した。テレビ会議システムの導入と神戸大学惑星科学研究センターの既存中継装置・ネットワークサーバの活用により、各テーマ・複数の機関に分散するメンバーの横断的な情報共有体制を確立、平成28年度の目標に対し、それぞれ以下のような検討(「京」への実装の可能性等)、ソフトウェア開発、試験計算を実施した。

(i) 岩石惑星「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」

愛媛大学・JAMSTEC・東京大学によりこれまで開発されてきた疑似圧縮法を用いた3次元熱対流シミュレーション用の数値コードACuTEManを火成活動・マントル対流結合系のシミュレーションへ向けて改良し、「地球シミュレータ」上に実装、並列計算のスケールリングが良好であることを確認した。これを用いて(図3)、3次元球殻で粘性率が温度に強く依存するマントル物質の熱対流の数値シミュレーションを行い、十分な放射性元素がない限り、月や水星のような小型惑星ではマントルで熱対流は定常的には起きないこと、金星や地球のような大型惑星でさえ弱い対流しか起きないことを確かめた。また対流しつつあるマントルにおけるマグマの分離過程の3次元シミュレーションにも成功し、マグマが分離するためにマントルの粘性率やマグマの浸透率が満たすべき条件を明らかにした。さらに、2次元シミュレーションから予想された火成活動・マントル湧昇流フィードバックが3次元空間でも機能することを確認した。プレートテクトニクスについては、「弱いプレート」のレジームでの3次元シミュレーションに成功し、現在、地球が属すると思われる「強いプレート」のレジームでのシミュレーションに取り組んでいる。これらの計算を通し、本格的な3次元計算で必要とされる計算資源をより正確に見積もるとともに、「京」への実装検討に着手した。

(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」

京都大学を中心として開発を進めて来た、ガス惑星大気の大循環・東西平均流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、並列計算のスケール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)が、計算速度の実効的向上のためには基本ルーチンの適合設計が必要となることを見出された。基本ライブラリの実装開発に並行して、数値計算で表現されるべき流れの構造の掌握のため、「地球シミュレータ」上に既に実装されているガス惑星大気スペクトルモデルによって「地球シミュレータ」で実現可能なレベルでの高精度高解像度試験計算を実行した。縞状構造を生成することに成功していると主張する先行研究では、計算資源の節約のため経度方向に対称性を仮定したセクター計算となっているのに対し、ここでは全球領域での数値実験に着手し、危惧

される問題点（対流から渦への表現への悪影響）の検証をすすめている。研究期間内での長時間積分の限りでは計算領域の差異による流れの明瞭な違いは見出されていないが、計算結果はいまだ定常状態までに達していない。さらなる長時間積分を実現すべく、ライブラリ的高速化にむけた改良討に着手し試行した。

(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」

理研 AICS において開発されている「京」に適した非静力学正二十面体モデル(SCALE-GM)を改良し惑星大気設定に拡張することを目指し、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)での既存の惑星大気実験設定を SCALE-GM で追跡し、計算結果を比較検討し知見として蓄積していくための諸設計と実装に着手した。比較基礎実験設定としては、地球大気力学基礎実験として提唱された Held & Suarez (1994) の設定を用い、まずは理想化地球大気条件での検証を実現、この設定に惑星大気において必要となる高高度拡張を施した実験を実施した(図 4)。高高度拡張実験の結果は QB0(準二年振動)的振動が見られるという予期に反したものがあつたのみならず、その結果が力学過程の数値表現に大きく依存するというものであつた。この結果は新規なものではなかつたが気象力学分野でこれまであまり注目されて来なかつた問題であり、惑星大気計算においては特にきちんと掌握されるべき根本的な問題となりえ、今後引続き詳細なる考察を行なうことにした。さらに、同様の基礎力学理想化実験の火星大気版である Mischna & Wilson (2006) の設定を両モデルに実装、「京」での比較実験に着手したが、結果の詳細吟味は平成 29 年度に継続されることとなつた。一方、今後 SCALE-GM を金星大気へ拡張することを見据え、また、我が国の金星探査機「あかつき」の探査結果を活用してモデルの開発改良を進めるため、「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た。大気の運動エネルギーを記述するエネルギースペクトルを求めたところ、 $-5/3$ 乗則が数千 km から数百 km のスケールで卓越しており、同スケール領域において -3 乗則が卓越する地球大気とは大きく異なる特徴を持っていることが明らかになつた。「あかつき」との比較においては、搭載の $2 \mu\text{m}$ 赤外線カメラ(IR2)によって存在が明らかになつた、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ストリーク構造と類似した構造が見出された。構造の詳細な解析は平成 29 年度に実施する。

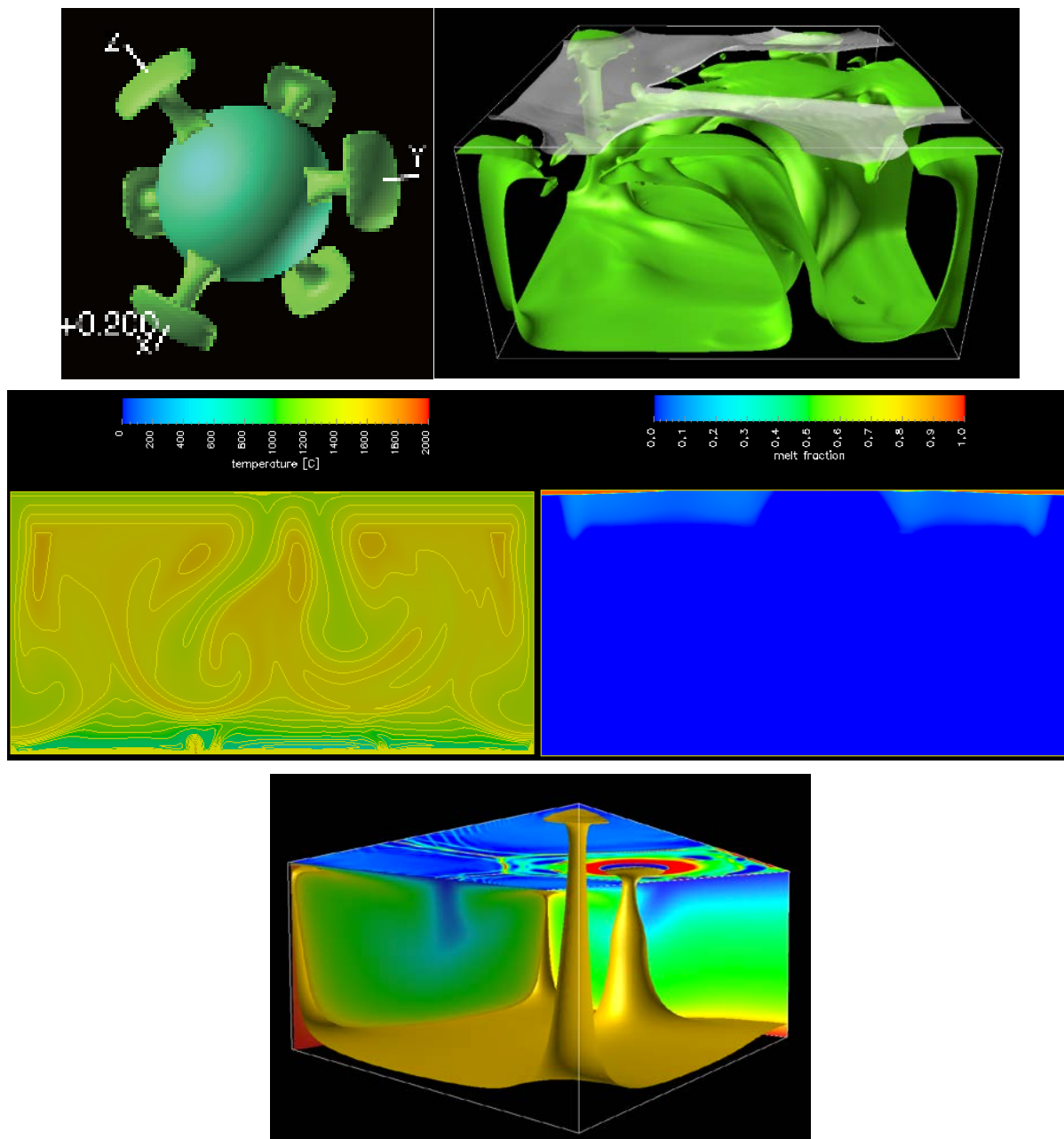


図3：対流しつつある3次元マントルに於けるマグマの生成・移動、そのマントル対流に与える反作用、特に地球のマントル対流を理解する上で重要なテクトニックプレートのシミュレーション。上左：球殻マントルにおける熱対流。上右：対流しているマントル中の液相分離。中：火成活動のモデル(左：温度分布、右：マグマ分布)。下：「弱いプレート」のレジームに於けるテクトニックプレートのモデル。計算は「地球シミュレータ」にて。

地球大気理想実験 (Held & Suarez, 1994 を高高度に拡張)
赤道上空の東西平均東西風の時系列

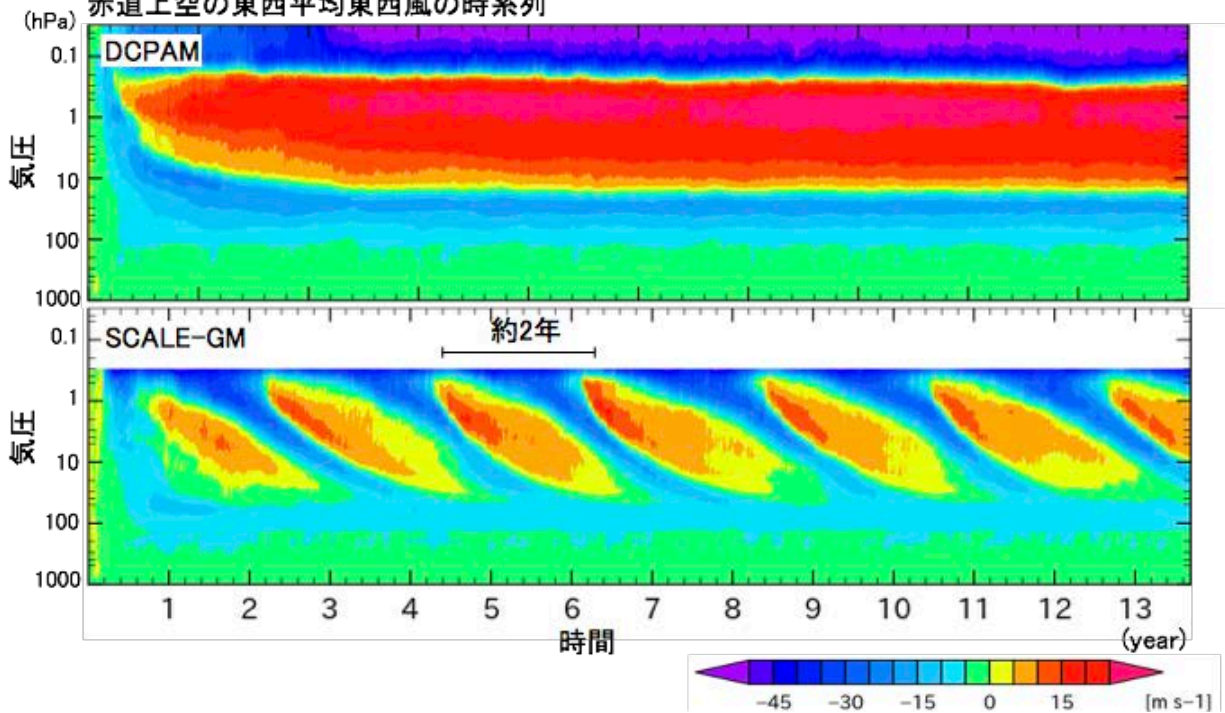


図4: Held & Suarez (1994) 高高度拡張実験における赤道上空東西平均風の時系列。惑星大気静力学スペクトルモデル (DCPAM) (上図) と非静力学正二十面体モデル (SCALE-GM) (下図)。赤道東西平均風の規則的 (QBO 的) 振動の出現はモデルの離散化表現、分解能、散逸過程等に依存し、その収束性の掌握は超高解像度計算への課題。計算は「京」にて。

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28年度において、サブ課題Cでは「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、初期データの整備を行った(4-1. 実施計画③⑪⑫に対応)。

(1) 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。

また、ポスト「京」での太陽全球計算を行う上で重要となる数値計算の解析手順について、抜本的改良をおこなった。ポスト「京」での計算は、個々の研究者が所有するサーバでの解析は困難になると考えており、大規模計算機内の計算途中での解析をおこなう。これまでは、Yin-Yang 格子上のデータを一つのMPI スレッドが全て持った上で、変換後の球座標を走査してデータを解析しやすいように準備していたが、水平方向に 4096×8192 程度のデータを持つと「京」のノードあたり16GBのメモリでは足りなくなってしまう。そこで、新しく緯度方向にも変換後の球座標を分割することにした。使用メモリを節約するためにいくつかのアルゴリズムを試し、計算量・通信量・メモリ使用量が最も節約できるアルゴリズムを採用することができた。その結果、球座標の太陽対流層計算としては世界最大である格子点数 $512 \times 4096 \times 8192$ という計算を実行することができた(図5,6)。

(2) 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した(図7)。

(3) 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マイクロスケール内部磁気圏シミュレーションの開発を進めた(図8)。

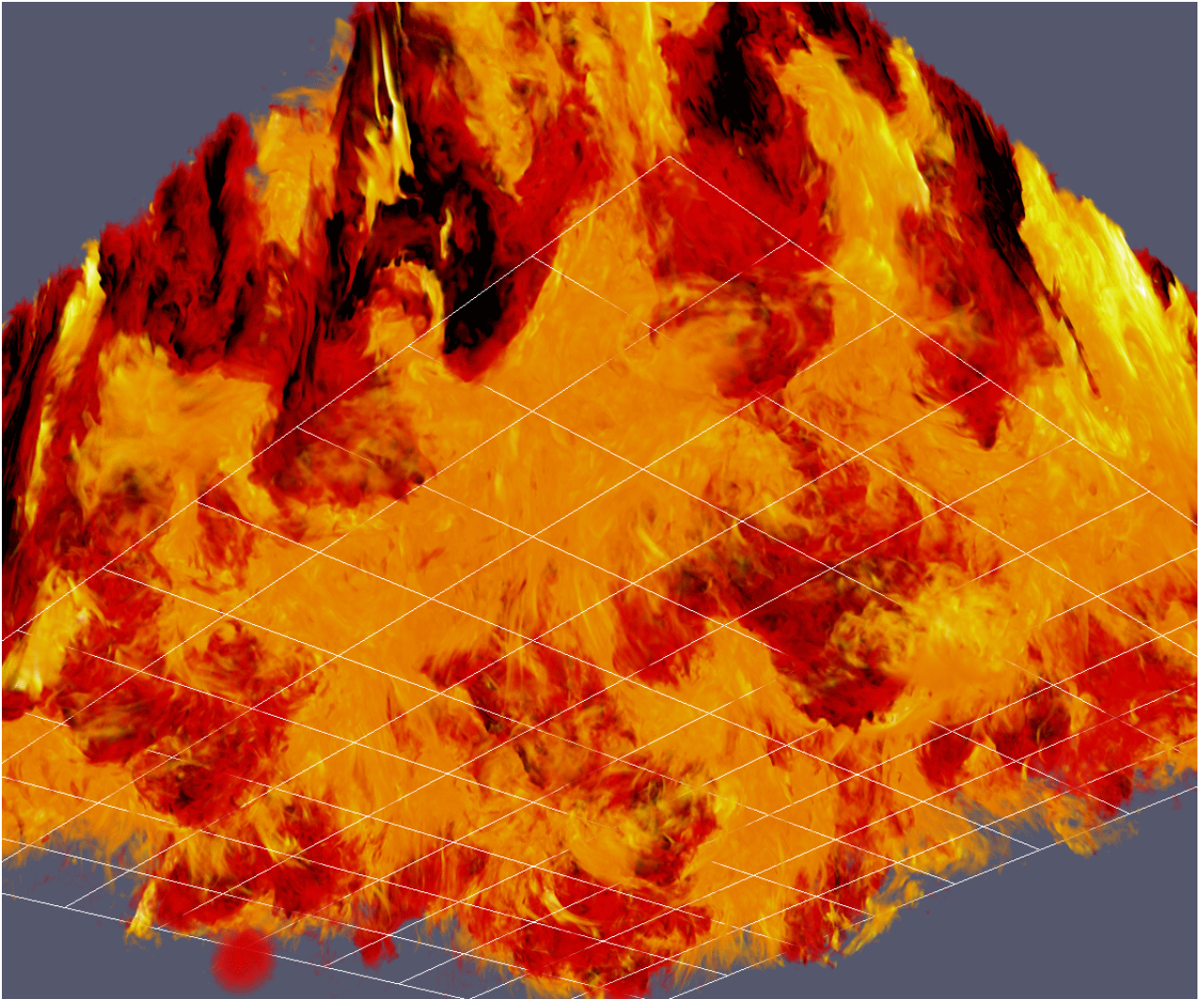


図5：太陽放射層対流層境界の超精密シミュレーション。

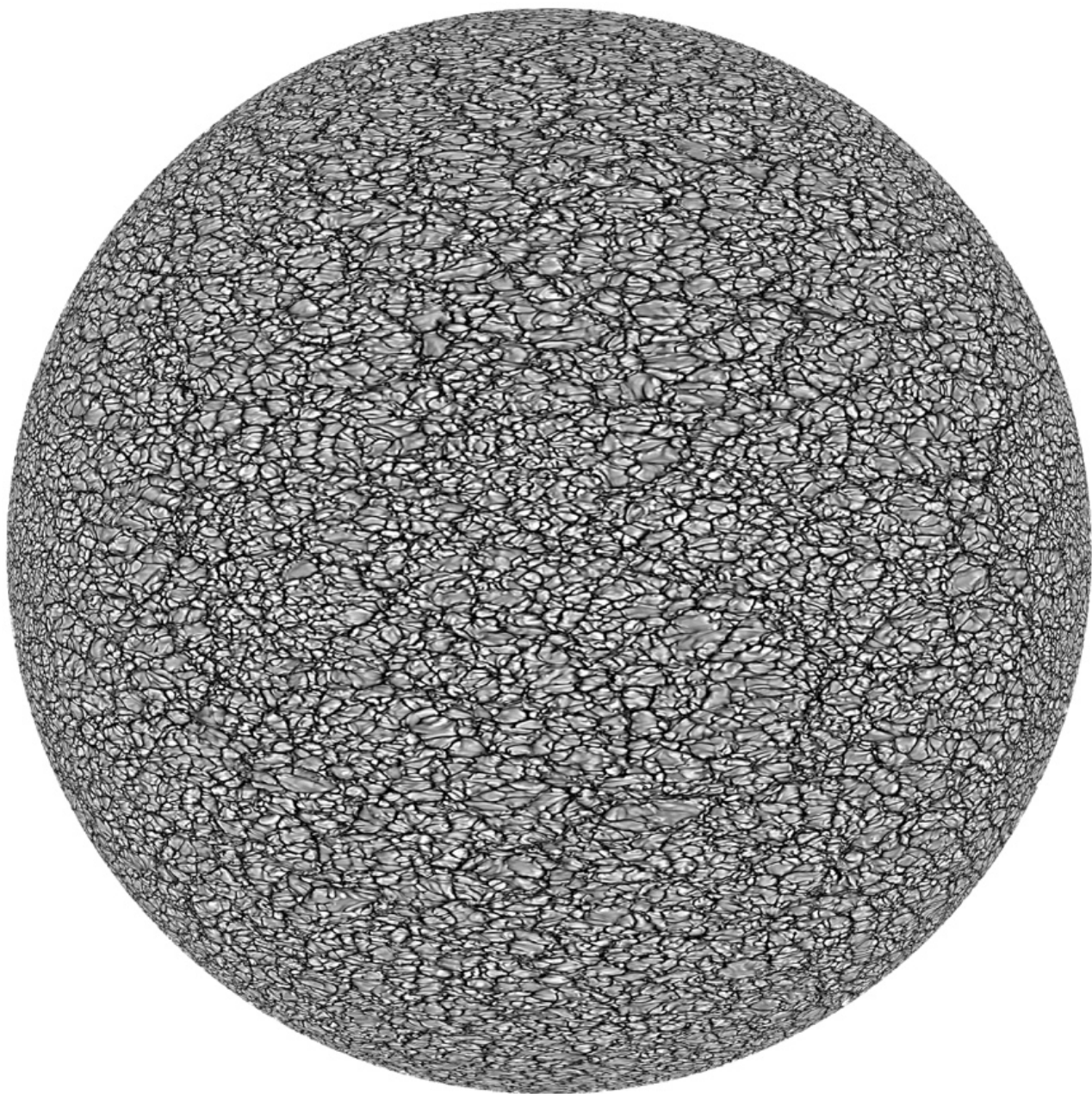


図6：アルゴリズムの変更によって解析が容易になった、世界最高解像度の太陽対流層計算。

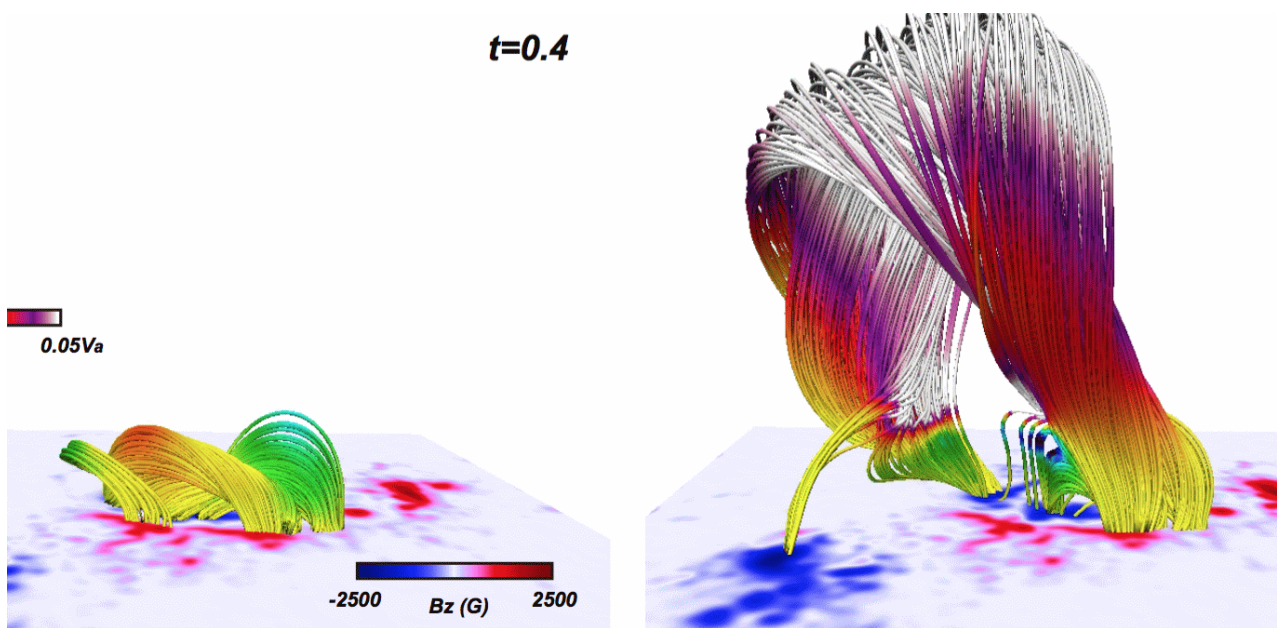


図7：太陽フレア爆発のデータ駆動型シミュレーション。

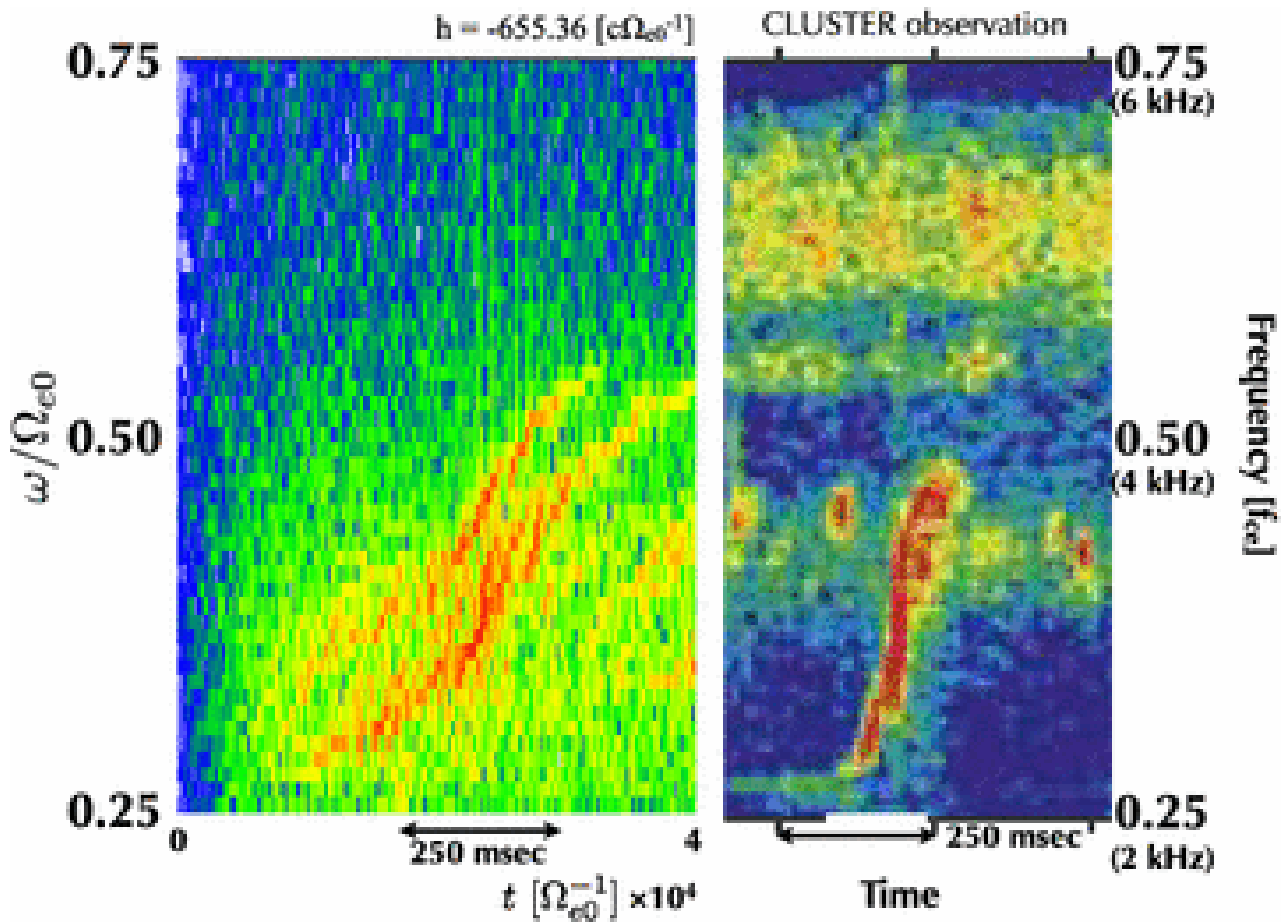


図 8 : 現実の地球磁気圏での磁場構造とプラズマ環境を用いた電磁放射のマイクロスケールシミュレーション (Katoh and Omura, 2016)。

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28年度において、サブ課題Dでは量子力学・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ことを目的として、「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、実施体制の構築を行った(4-1. 実施計画④③に対応)。

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、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を進めた。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として、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」でのチューニングを行った(重点課題7A-iiと共同)。さらに、フラグメント分子軌道法のGPU実装を行い、HA-PACSを用いて2万原子超の系の電子状態計算を行なった。以下に、その成果の一部を示す。

(1) 非ラジカル反応でのアミノ酸生成経路の解析

宇宙空間におけるアミノ酸の生成に関して様々な反応経路が提唱されている。我々は、アミノアセトニトリルからヒダントインが生成し(Bücherer-Bergs反応)、ヒダントインが加水分解されることで、最も単純なアミノ酸であるグリシンが生成する経路を、量子化学計算を用いて解析した(図9)。アミノアセトニトリルは星間雲で観測されており、また、ヒダントインも隕石から検出されているなど、ともに宇宙化学において重要な分子である。密度汎関数法(DFT, Density Functional Theory)を用い、汎関数はB3LYP、基底関数は6-31G*として計算を行った。星間ダスト上の氷表面の影響を検証する為、触媒として働く水分子がない場合と1個、さらに2個存在する場合について、反応障壁の高さを比較した。図9に示したように、9つの遷移状態を経る反応経路について検証を行った。最も反応障壁が高い反応は、触媒となる水分子なし及び1個を考慮した場合で、それぞれ71.5 kcal/mol及び56.1 kcal/molとなり、水分子を考慮することで、15 kcal/mol反応障壁が下がった。更に、触媒となる水分子を2個に増やすと、障壁は46.9 kcal/molに減少した。このことから、触媒となる水分子、即ち、星間ダスト上の氷表面の重要性が示された。しかし、反応障壁は依然として高いことから、更なる解析を進めている。

(2) フラグメント分子軌道法の開発及びメニーコア・アーキテクチャへの実装

これまでタンパク質や宇宙空間中の大規模系なダスト表面に対して電子論的エネルギー変化や相互作用変化を解析するため、フラグメント分子軌道(FMO)法の開発を行ってきた。平成28年度は、我々の開発しているコードOpenFMOにハイブリッド密度汎関数(DFT)法をメニーコア・アーキテクチャに実装した。以前のハートリーフォック法のGPU実装に加え、DFT計算に現れる数値積分をOpenMPにより実装し、ベンチマークテストを筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータHA-PACS base cluster(64ノード)において実行した。ターゲットとして、インフルエンザHA3タンパク質(23460原子、721フラグメント)に対して、FMO-HF/6-31g(d)およびFMO-

B3LYP/6-31g(d)計算を行なった。一般的に B3LYP の方が自己無撞着 (SCF) 計算回数が多くなる (HF : 26 回、B3LYP : 38 回) ため、また、数値積分の計算 2 時間がかかるため、全体の実行時間は約 4.8 倍となった(表 1)。平成 29 年度は DFT 部分のさらなる GPU 化を進める方針である。

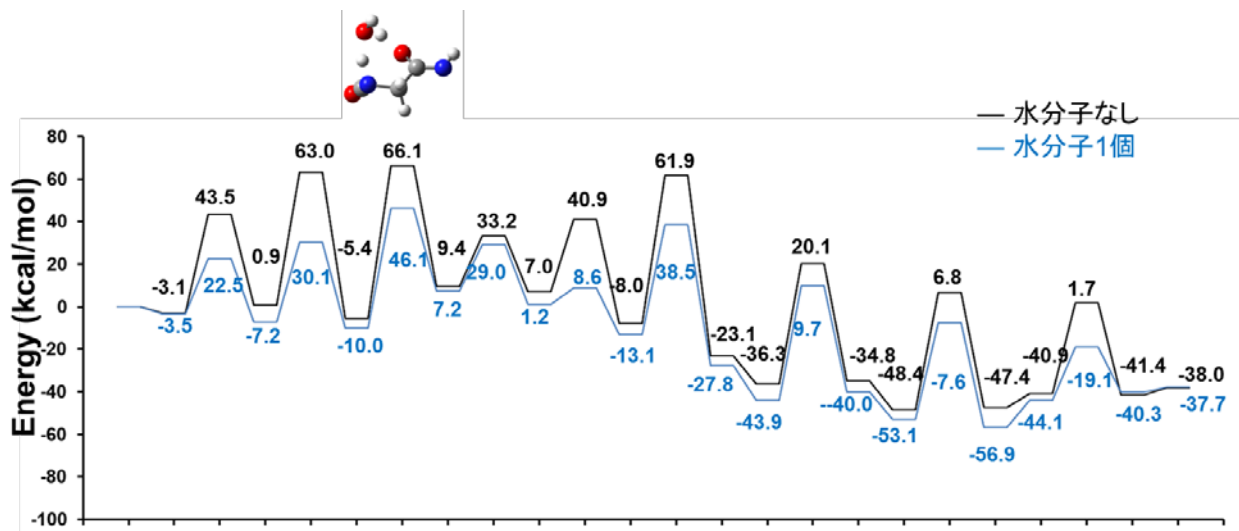
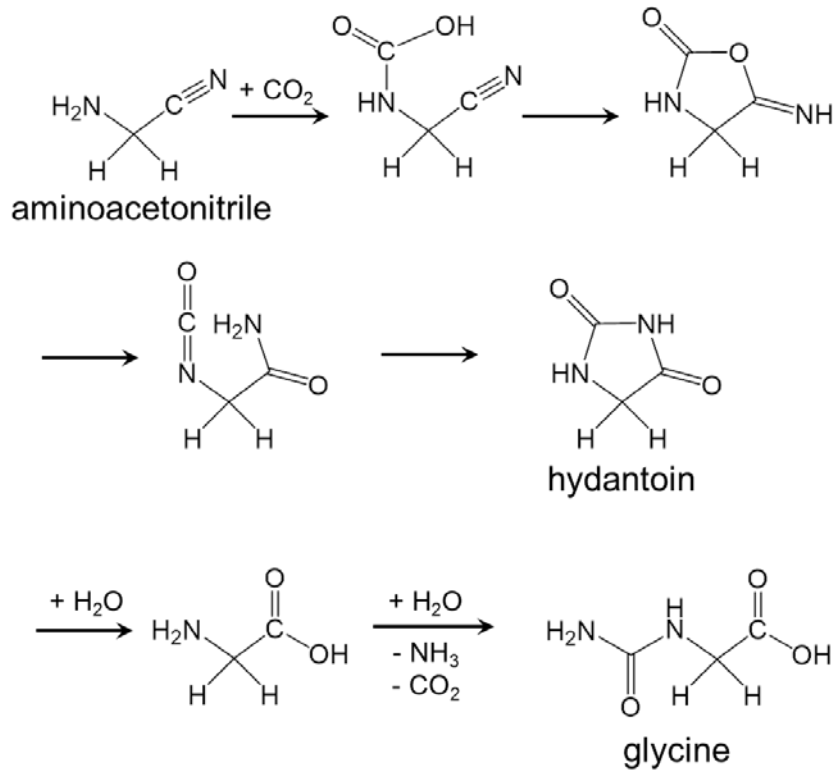


図9：グリシン生成経路と反応エネルギープロファイル

表 1 : FMO 計算における、#SCC (SCF の回数) および各々の計算時間 T(X) (X:SCC (Self-consistent Charge)、Dimer SCF+ES (Electro Static)、Total)

	#SCC	T(SCC)	T(SCC)/#SCC	T(Dimer SCF+ES)	T(Total) [min]
FMO-B3LYP	38	417.2	10.99	314.4	731.8
FMO-HF	26	42.38	1.630	108.7	151.4

4-3. 活動（研究会等）

開催行事

日時/場所	活動名	参加者
平成 28 年 9 月 16 日 神戸大学	第 21 回神戸大学長定例記者会見 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	研究代表者(牧野)
平成 28 年 9 月 19 日 神戸大学 惑星科学研究センター	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	出席者：28 名 TV 会議参加者：2 名
平成 29 年 3 月 6 日 神戸大学統合研究拠点 コンベンションホール	ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星 第 1 回 公開シンポジウム：惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して	出席者：38 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 28 年 8 月 1 日	運営委員会準備会合	13 名
平成 28 年 10 月 12 日	第 1 回運営委員会	12 名
平成 28 年 12 月 19 日	第 2 回運営委員会	11 名
平成 29 年 2 月 14 日	第 3 回運営委員会	10 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	計算科学研究機構FS2020プロジェクト コードデザイン推進チーム 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
Small-scale dynamo in the solar interior (口頭)	Hideyuki Hotta, Matthias Rempel, Takaaki Yokoyama	Goslar, Germany (Solar and Stellar Magnetic Fields: a conference in honor of Manfred Schüssler)	平成28年8月9日	国外
Comparison of computational methods of associated Legendre functions (ポスター)	Takeshi Enomoto	Gran Sasso Science Institute, L' Aquila, Italy (International Summer School on Atmospheric and Oceanic Sciences 2016)	平成28年8月28日	国外
High-Resolution Global N-body Simulation of Planetary Formation: Migration of a Protoplanet (口頭)	小南 淳子	石垣島ビーチホテルサンシャイン (Japan-Germany Planet Disk Workshop)	平成28年9月1日	国内
Onset Mechanism of Solar Eruptions(口頭)	Kanya Kusano, Yumi Bamba, Satoshi Inoue, Naoyuki Ishiguro, Johan Muhamad, Takuya Shibayama, Daikou Shiota, Shinsuke Imada, Takahiro Miyoshi, Yuki Asahi, Yuta Mizuno and Hiroyasu Yonaha	名古屋大学 (Hinode-10 Science Meeting)	平成28年9月8日	国内
月内部進化の初期温度依存性 (口頭)	小河 正基	ノートルダム清心女子大学 (日本惑星科学会2016年秋季講演会)	平成28年9月14日	国内
磁場の効果を中心とした太陽オーバershoot層の精密な調査 (口頭)	堀田 英之	愛媛大学 (日本天文学会2016年秋季年会)	平成28年9月15日	国内
ポスト「京」萌芽的課題スタートー惑星の起源・進化と環境変動の解明を目指して (口頭)	牧野 淳一郎	神戸大学 (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)	平成28年9月19日	国内
Global Disk Simulations with Athena++ (口頭)	富田 賢吾	神戸大学 (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)	平成28年9月19日	国内
「京」&ポスト「京」で惑星を作る：第二の地球はあるのか (口頭)	小南 淳子	神戸大学 (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)	平成28年9月19日	国内
Framework for Developing Particle Simulators (口頭)	岩澤 全規	神戸大学 (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)	平成28年9月19日	国内
サブ課題B 惑星内部・表層のダイナミクスと進化 (口頭)	林 祥介	神戸大学 (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)	平成28年9月19日	国内

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
ポスト京での超解像度火星大気全球シミュレーション(口頭)	高橋 芳幸	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
Scalable Computing for Advanced Library and Environment(SCALE)の現状(口頭)	富田 浩文	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
ポスト京コンピュータへ向けた惑星内部グループの取り組み(口頭)	小河 正基	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
ポスト京萌芽的課題サブB ガス惑星大気(口頭)	竹広 真一	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
サブ課題C 太陽活動による地球環境変動の解明(口頭)	草野 完也	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
太陽フレア・コロナ質量放出モデル(口頭)	塩田 大幸	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
宇宙天気予測システムシミュレーション(口頭)	深沢 圭一郎、加藤 雄人	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
磁気リコネクショングループ(口頭)	柴山 拓也、草野 完也	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
サブ課題D 原始太陽系における物質進化と生命起源(口頭)	梅村 雅之	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
星・惑星形成領域における化学反応ネットワークモデル(口頭)	古家 健次	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
第一原理計算に基づく物質の起源の探求(口頭)	重田 育照	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
星間空間におけるL型アミノ酸過剰生成の理論的検証(口頭)	庄司 光男	神戸大学(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)	平成28年9月19日	国内
簡易金星版 AFES 高解像度計算におけるエネルギースペクトルの鉛直分布(口頭)	樫村 博基, 杉本 憲彦, 高木 征弘, 大淵 済, 榎本 剛, 高橋 芳幸, 林 祥介	名古屋大学(日本気象学会2016年度秋季大会)	平成28年10月27日	国内
太陽地球圏環境の予測研究について(口頭)	草野 完也	情報通信研究機構本部(第13回宇宙環境シンポジウム)	平成28年11月2日	国内
Current Status of Athena++(口頭)	富田 賢吾	国立天文台三鷹(国立天文台 CfCAユーザズミーティング)	平成28年11月30日	国内
簡易金星版 AFES 高解像度計算における運動エネルギースペクトル解析(口頭)	樫村 博基, 杉本 憲彦, 高木 征弘, 松田 佳久, 大淵 済, 榎本 剛, 中島 健介, 高橋 芳幸, 林 祥介	JAXA宇宙科学研究所(第30回大気圏シンポジウム)	平成28年12月6日	国内

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
Onset Mechanism of Solar Eruptions(口頭)	Kanya Kusano, Yumi Bamba, Satoshi Inoue, Naoyuki Ishiguro, Johan Muhamad, Takuya Shibayama, Daikou Shiota, Shinsuke Imada, Takahiro Miyoshi, Yuki Asahi, Yuta Mizuno and Hiroyasu Yonaha	Brisbane Convention and Exhibition Centre, Brisbane, Australia (13th APCC-AIP Congress)	平成28年12月8日	国外
Terrestrial magma ocean origin of the Moon: A numerical study of a giant impact incorporating the different equations of state for melts and solids (ポスター)	N Hosono, S I Karato, J Makino	Moscone Convention Center, San Francisco, USA(American Geophysical Union fall meeting)	平成28年12月15日	国外
Numerical studies of mantle evolution in planets of various sizes (ポスター)	Ogawa, M., Kameyama, M., Yanagisawa, M.	Moscone Convention Center, San Francisco, USA(American Geophysical Union fall meeting)	平成28年12月12日	国外
微惑星連星の進化、集積から探る冥王星や円盤外側の惑星の形成・起源(口頭)	小南 淳子	東京工業大学 (第5回衛星系研究会：冥王星系の起源)	平成29年1月25日	国内
Athena++で学ぶ流体力学 講師 (口頭)	富田 賢吾	国立天文台三鷹 (国立天文台流体学校)	平成29年2月18日～	国内
A theoretical study of glycine formation reactions in interstellar medium (ポスター)	Megumi Kayanuma, Kaori Kidachi, Yu Komatsu, Akimasa Sato, Mitsuo Shoji, Yasuteru Shigeta, Yuri Aikawa, Masayuki Umemura	St. Simons Island(King and Prince Hotel), Georgia, USA (The 57th Sanibel Symposium)	平成29年2月20日	国外
Simulation of the Venus Atmosphere—Results of a simplified Venus GCM (口頭)	樫村 博基	国立天文台三鷹 (惑星大気研究会)	平成29年2月21日	国内
Solar global convection and dynamo with reduced speed of sound technique (口頭)	Hideyuki Hotta, Matthias Rempel, Takaaki Yokoyama	神戸大学 (The 7th AICS International Symposium)	平成29年2月23日	国内
Ly alpha Irradiation in the Early Phase Milky Way Galaxy, Responsible for Initiating Homochirality(口頭)	Akimasa Sato, Yasuteru Shigeta, Mitsuo Shoji, Katsumasa Kamiy, Kenji Shiraishi, Kazuhiro Yabana, Masayuki Umemura	Lorentz Center, Leiden, The Netherlands (Formation of the Solar System and the Origin of Life Workshop)	平成29年2月23日	国外
金星探査機あかつきと惑星気象学の新展開 (口頭)	今村 剛	神戸大学 (ポスト「京」 萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
宇宙地球環境の未来を探る次世代シミュレーション (口頭)	草野 完也	神戸大学 (ポスト「京」 萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内

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
ポスト京時代の太陽ダイナモ計算にむけて(口頭)	堀田 英之	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
ジオスペース探査: ERGプロジェクト	三好 由純	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
地球磁気圏・人工衛星環境のMHD・PIC連成シミュレーション(口頭)	加藤 雄人	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
金星大気大循環の数値モデリング(口頭)	高木 征弘	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
マントルダイナミクスの3次元数値モデルの構築(口頭)	小河 正基	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
球面調和関数変換ライブラリのXeon Phi KNL向けチューニングの試み(口頭)	石岡 圭一	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
正二十面体格子モデルSCALE-GMによる火星大気シミュレーションに向けて(口頭)	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	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
第二の地球、地球たち、ハビタブル惑星(口頭)	井田 茂	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
MHD Simulations of Protoplanetary Disks with Athena++(口頭)	富田 賢吾	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
大規模N体計算で惑星を作る(口頭)	小南 淳子	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
生命起源解明のためのアミノ酸生成と分解機構についての量子化学研究(口頭)	庄司 光男	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
星間空間におけるアミノ酸生成反応の第一原理計算(口頭)	栢沼 愛	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
原始惑星系円盤乱流場中のダスト成長過程(口頭)	石原 卓	神戸大学(ポスト「京」萌芽的課題・計算惑星第1回公開シンポジウム)	平成29年3月6日	国内
High-Resolution Global N-body Simulation of Planetary Formation with Fragmentation: Migration of a Protoplanet(口頭)	小南 淳子	北海道大学(国際氷天体ワークショップ)	平成29年3月8日	国内
熱対流の散逸について(口頭)	堀田 英之	九州大学(日本天文学会2017年春季年会)	平成29年3月17日	国内
High-resolution calculation of solar dynamo(口頭)	Hideyuki Hotta, Matthias Rempel, Takaaki Yokoyama	松山ひめぎんホール(The US-Japan Workshop and School on Magnetic Reconnection(MR2017))	平成29年3月22日	国内

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
A quantum chemical study of the glycine formation reactions in interstellar medium(口頭)	Mitsuo Shoji	広島大学 (アストロバイオロジーセンター (ABC) 国際ワークショップ)	平成29年3月23日	国内

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
Numerical studies on initial condition-dependence of mantle evolution of the Moon governed by magmatic redistribution of heat producing elements	Ogawa, M.	Planet. Space Sci.	平成28年11月18日	国外
Extremely long transition phase of thermal convection in the mantle of massive super-Earths	Miyagoshi, T., Kameyama, M., Ogawa, M.	Earth Planet Space	平成29年3月24日	国内

(別添)

「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

平成 29 年 5 月 29 日
国立大学法人神戸大学
理学研究科 教授 牧野 淳一郎

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

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て、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統一的に計算し、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>
--	---	--	--	--

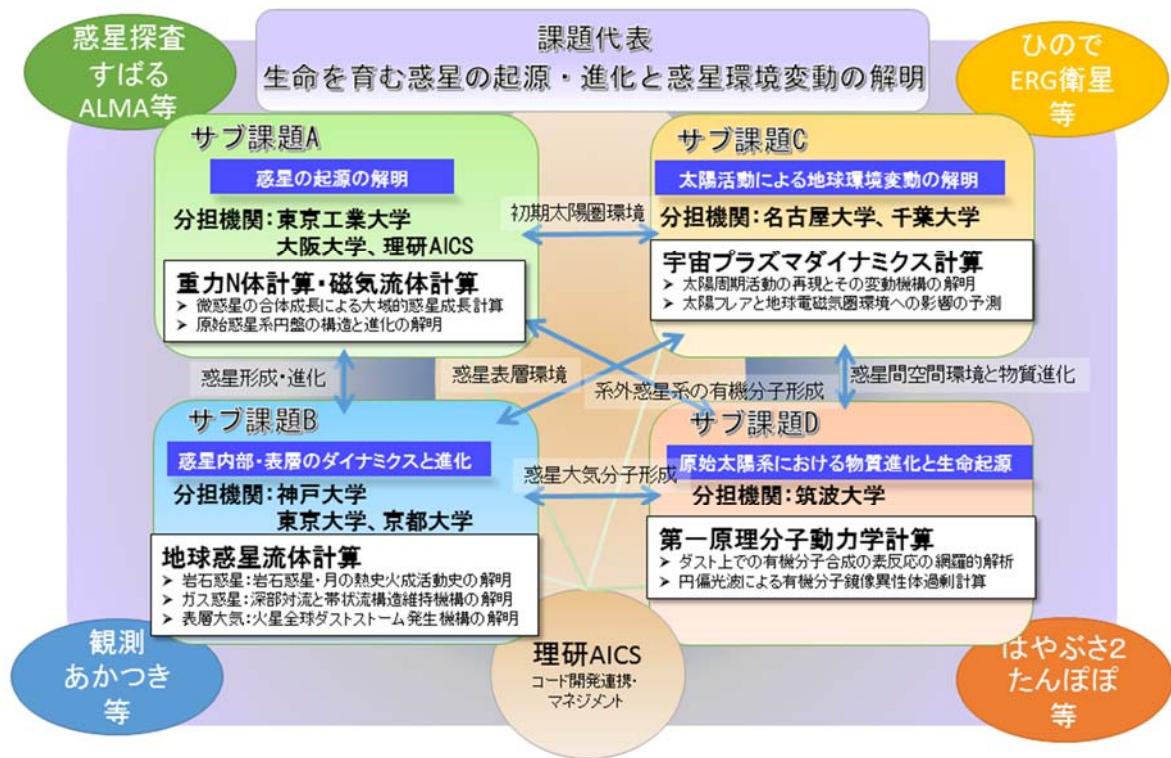
<p>サブ課題C 太陽活動による地球環境変動の解明 (名古屋大学・草野完也)</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境モデルの開発と初期データ整備</p> <p>(実施内容) 「京」を使って太陽対流層モデルの計算を行うと共に、フレアモデル・磁気圏モデル・衛星環境モデルの開発を行い、初期データを整備する。</p>	<p>(目標) 太陽対流層、太陽活動領域、磁気圏、衛星環境モデルの初期実験</p> <p>(実施内容) 「京」を使って太陽対流層モデルの計算を継続すると共に、太陽周期変動の機構を探ると共に、フレア・磁気圏・衛星環境の初期実験を実施する。</p>	<p>(目標) 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は筑波大が全体を推進し、「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	10, 750, 000	10, 750, 000

「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	1, 630, 000	1, 630, 000

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：

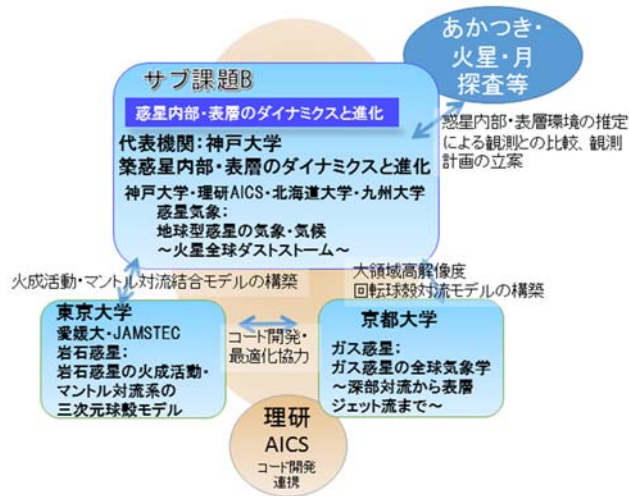
モデルを順次拡張し、「あかつき」探査との対峙が期待される金星大気の対流解像全球循環計算を目指すとともに、太陽系あるいは太陽系外の地球型惑星大気の対流と大循環の多様性に迫る高解像度計算を実現する。

(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生成過程を再現する。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)

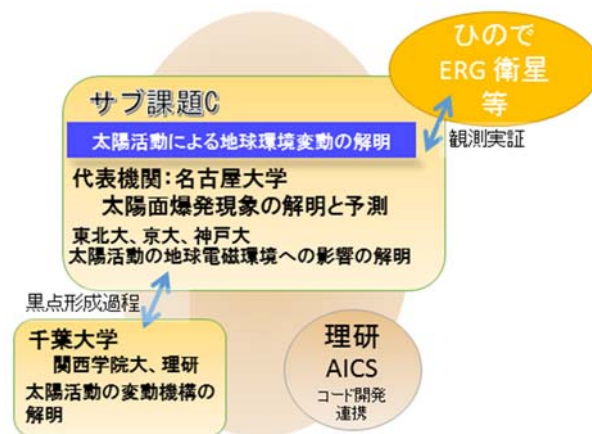
現在の世界最高解像度である $256 \times 768 \times 1536$ という計算を50年程度実行し、不安定な周期活動を再現している (Hotta et al. 2016, Science)。また、より高解像度の 4.3×10^{12} ($=4096 \times 32000 \times 32000$) の格子点数を用いた全ノード計算を極短時間おこない、世界最高に近い理論ピーク性能比 (24%) を達成している。

(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。

(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、名古屋大の石原は、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。

(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)	分担機関 (サブ課題責任者)
	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)
	名古屋大学大学院工学研究科	分担機関

(別紙2) 所要経費

1. ベース目標における所要経費

1-(1) 全体計画

(単位：千円)

費目種別		調査研究・準備研究		本格実施		
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度	
設備備品費		10,580				旧区分
試作品費		0				
人件費		16,874				
業務実施費	消耗品費	3,619				
	国内旅費	4,796				
	外国旅費	7,819				
	会議開催費	111				
	雑役務費	242				
	電子計算機諸費	2,060				
	その他	35				
間接経費		13,842				
物品費	設備備品費		2,369	3,000	3,000	新区分
	消耗品費		2,440	1,830	1,830	
人件費・謝金	人件費		36,623	35,076	35,076	
	謝金		0	0	0	
旅費	旅費		16,120	15,143	15,143	
その他	外注費(雑役務費)		5,520	6,000	6,000	
	印刷製本費		1,010	488	488	
	会議費		1,400	1,435	1,435	
	通信運搬費		12	12	12	
	光熱水料		0	0	0	
	その他(諸経費)		145	0	0	
	消費税相当額		3,594	2,915	2,915	
間接経費			20,771	19,771	19,771	
合計		59,978	90,004	85,670	85,670	321,322

1-(2) 機関ごと

(単位：千円)

機関名(代表者)		代表機関：神戸大学 (牧野 淳一郎)				
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度	
設備備品費		0				旧区分
試作品費		0				
人件費		3825				
業務実施費	消耗品費	337				
	国内旅費	282				
	外国旅費	0				
	会議開催費	111				
	雑役務費	0				
	電子計算機諸費	0				
	その他	24				
間接経費		1374				
物品費	設備備品費		0	0	0	新区分
	消耗品費		0	0	0	
人件費・謝金	人件費		6,734	5,732	5,732	
	謝金		0	0	0	
旅費	旅費		653	780	780	
その他	外注費(雑役務費)		200	0	0	
	印刷製本費		0	0	0	
	会議費		1,400	1,435	1,435	
	通信運搬費		0	0	0	
	光熱水料		0	0	0	
	その他(諸経費)		0	0	0	
	消費税相当額		509	468	468	
間接経費			2,849	2,524	2,524	
合計		5,953	12,345	10,939	10,939	40,176

(単位：千円)

機関名(代表者)		東京工業大学(井田 茂)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		682			
試作品費		0			
人件費		4,529			
業務 実施費	消耗品費	0			
	国内旅費	448			
	外国旅費	2,155			
	会議開催費	0			
	雑役務費	0			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		2,344			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		0	0	0
人件費・ 謝金	人件費		6,922	6,481	6,481
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		2,412	2,661	2,661
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		699	657	657
間接経費			3,010	2,940	2,940
合計		10,158	13,043	12,739	12,739
					48,679

(単位：千円)

機関名(代表者)		大阪大学(富田 賢吾)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		1,481			
試作品費		0			
人件費		0			
業務 実施費	消耗品費	0			
	国内旅費	121			
	外国旅費	396			
	会議開催費	0			
	雑役務費	0			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		600			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		72	0	0
人件費・ 謝金	人件費		2,752	2,777	2,777
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		1,789	1,717	1,717
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		325	305	305
間接経費			1,481	1,440	1,440
合計		2,598	6,419	6,239	6,239
					21,495

(単位：千円)

機関名(代表者)		理化学研究所計算科学研究機構 (牧野淳一郎)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		0			
試作品費		0			
人件費		0			
業務 実施費	消耗品費	251			
	国内旅費	127			
	外国旅費	319			
	会議開催費	0			
	雑役務費	60			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		227			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		709	380	380
人件費・ 謝金	人件費		0	0	0
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		474	769	769
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		0	20	20
間接経費			355	351	351
合計		984	1,538	1,520	1,520
					5,562

(単位：千円)

機関名(代表者)		神戸大学 (林祥介)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		4,280			
試作品費		0			
人件費		2,968			
業務 実施費	消耗品費	752			
	国内旅費	1,638			
	外国旅費	276			
	会議開催費	0			
	雑役務費	15			
	電子計算機諸費	0			
	その他	11			
間接経費		2,982			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		529	500	500
人件費・ 謝金	人件費		7,501	7,350	7,350
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		2,778	2,424	2,424
その他	外注費(雑役務費)		320	300	300
	印刷製本費		500	488	488
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		12	12	12
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		662	226	226
間接経費			3,691	3,390	3,390
合計		12,922	15,993	14,690	14,690
					58,295

(単位：千円)

機関名 (代表者)		東京大学 (小河 正基)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		0			
試作品費		0			
人件費		0			
業務 実施費	消耗品費	294			
	国内旅費	506			
	外国旅費	0			
	会議開催費	0			
	雑役務費	0			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		240			
物品費	設備備品費		442	0	0
	消耗品費		52	400	400
人件費・ 謝金	人件費		0	0	0
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		1,122	1,265	1,265
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		85	0	0
	消費税相当額		44	35	35
間接経費			524	510	510
合計		1,040	2,269	2,210	2,210

(単位：千円)

機関名 (代表者)		京都大学 (竹広 真一)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		0			
試作品費		0			
人件費		0			
業務 実施費	消耗品費	0			
	国内旅費	375			
	外国旅費	0			
	会議開催費	0			
	雑役務費	24			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		119			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		16	200	200
人件費・ 謝金	人件費		0	0	0
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		1,124	965	965
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		58	35	35
間接経費			359	360	360
合計		518	1,557	1,560	1,560

(単位：千円)

機関名(代表者)		名古屋大学(草野 完也)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		3,156			
試作品費		0			
人件費		2,837			
業務 実施費	消耗品費	914			
	国内旅費	505			
	外国旅費	256			
	会議開催費	0			
	雑役務費	0			
	電子計算機諸費	2,060			
	その他	0			
間接経費		2,919			
物品費	設備備品費		1,927	1,500	1,500
	消耗品費		273	0	0
人件費・ 謝金	人件費		5,929	6,481	6,481
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		1,199	769	769
その他	外注費(雑役務費)		3,000	3,700	3,700
	印刷製本費		510	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		516	539	539
間接経費			4,007	3,897	3,897
合計		12,647	17,361	16,886	16,886
					63,780

(単位：千円)

機関名(代表者)		千葉大学(堀田 英之)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		0			
試作品費		0			
人件費		0			
業務 実施費	消耗品費	317			
	国内旅費	190			
	外国旅費	0			
	会議開催費	0			
	雑役務費	3			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		153			
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		355	350	350
人件費・ 謝金	人件費		0	0	0
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		370	413	413
その他	外注費(雑役務費)		0	0	0
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		60	0	0
	消費税相当額		19	17	17
間接経費			241	234	234
合計		663	1,045	1,014	1,014
					3,736

(単位：千円)

機関名 (代表者)		筑波大学 (梅村 雅之)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費		981			
試作品費		0			
人件費		2,715			
業務 実施費	消耗品費	754			
	国内旅費	604			
	外国旅費	4,417			
	会議開催費	0			
	雑役務費	140			
	電子計算機諸費	0			
	その他	0			
間接経費		2,884			
物品費	設備備品費		0	1,500	1,500
	消耗品費		377	0	0
人件費・ 謝金	人件費		6,785	6,255	6,255
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		3,199	2,423	2,423
その他	外注費(雑役務費)		1,000	1,000	1,000
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		717	571	571
間接経費			3,624	3,525	3,525
合計		12,495	15,702	15,274	15,274
					58,745

(単位：千円)

機関名 (代表者)		名古屋大学 (石原 卓)			
費目種別		調査研究・準備研究		本格実施	
大項目	中項目	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
設備備品費					
試作品費					
人件費					
業務 実施費	消耗品費				
	国内旅費				
	外国旅費				
	会議開催費				
	雑役務費				
	電子計算機諸費				
	その他				
間接経費					
物品費	設備備品費		0	0	0
	消耗品費		57	0	0
人件費・ 謝金	人件費		0	0	0
	謝金		0	0	0
旅費	旅費		1,000	957	957
その他	外注費(雑役務費)		1,000	1,000	1,000
	印刷製本費		0	0	0
	会議費		0	0	0
	通信運搬費		0	0	0
	光熱水料		0	0	0
	その他(諸経費)		0	0	0
	消費税相当額		45	42	42
間接経費			630	600	600
合計		0	2,732	2,599	2,599
					7,930

1 - (3) サブ課題ごと

(単位：千円)

	大項目	調査研究・準備研究		本格実施		計
		H28年度	H29年度	H30年度	H31年度	
全体取り まとめ	設備備品費	10,580				旧区分
	試作品費	0				
	人件費	16,874				
	業務実施費	18,682				
	間接経費	13,842				
	物品費		4,809	4,830	4,830	新区分
	人件費・謝金		36,623	35,076	35,076	
	旅費		16,120	15,143	15,143	
	その他		11,681	10,850	10,850	
	間接経費		20,771	19,771	19,771	
小計	59,978	90,004	85,670	85,670	321,322	
サブ課題 A	設備備品費	2,163				旧区分
	試作品費	0				
	人件費	4,529				
	業務実施費	3,877				
	間接経費	3,171				
	物品費		781	380	380	新区分
	人件費・謝金		9,674	9,258	9,258	
	旅費		4,675	5,147	5,147	
	その他		1,024	982	982	
	間接経費		4,846	4,731	4,731	
小計	13,740	21,000	20,498	20,498	75,736	
サブ課題 B	設備備品費	4,280				旧区分
	試作品費	0				
	人件費	6,793				
	業務実施費	4,645				
	間接経費	4,715				
	物品費		1,039	1,100	1,100	新区分
	人件費・謝金		14,235	13,082	13,082	
	旅費		5,677	5,434	5,434	
	その他		3,790	2,999	2,999	
	間接経費		7,423	6,784	6,784	
小計	20,433	32,164	29,399	29,399	111,395	
サブ課題 C	設備備品費	3,156				旧区分
	試作品費	0				
	人件費	2,837				
	業務実施費	4,245				
	間接経費	3,072				
	物品費		2,555	1,850	1,850	新区分
	人件費・謝金		5,929	6,481	6,481	
	旅費		1,569	1,182	1,182	
	その他		4,105	4,256	4,256	
	間接経費		4,248	4,131	4,131	
小計	13,310	18,406	17,900	17,900	67,516	
サブ課題 D	設備備品費	981				旧区分
	試作品費	0				
	人件費	2,715				
	業務実施費	5,915				
	間接経費	2,884				
	物品費		434	1,500	1,500	新区分
	人件費・謝金		6,785	6,255	6,255	
	旅費		4,199	3,380	3,380	
	その他		2,762	2,613	2,613	
	間接経費		4,254	4,125	4,125	
小計	12,495	18,434	17,873	17,873	66,675	
合計		59,978	90,004	85,670	85,670	321,322

(別紙3) 「京」の計算資源量

1. 目標

(単位：ノード時間/年)

	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度
サブ課題A	1,809,813	633,590	2,250,000	2,250,000
惑星集積		422,393	1,500,000	1,500,000
原始惑星系円盤		211,197	750,000	750,000
サブ課題B	204,041	633,590	2,250,000	2,250,000
岩石惑星		56,319	200,000	200,000
ガス惑星		14,080	50,000	50,000
惑星大気		563,191	2,000,000	2,000,000
サブ課題C	2,309,334	1,379,816	4,900,000	4,900,000
太陽対流層		1,126,382	4,000,000	4,000,000
磁気リコネクション		168,957	600,000	600,000
地球磁気圏		84,479	300,000	300,000
サブ課題D	0	380,154	1,350,000	1,350,000
量子化学計算		154,878	550,000	550,000
ダスト計算		225,276	800,000	800,000
合計	4,323,188	3,027,150	10,750,000	10,750,000

(別紙4) 「京」以外の計算資源量

1. 目標

(単位：ノード時間/年)

	H28年度	H29年度	H30年度	H31年度	計算資源機関名
サブ課題A	150,000	150,000	150,000	150,000	宇宙航空研究開発機構 スーパーコンピュータ・システム (JSS2)
惑星集積	100,000	100,000	100,000	100,000	
原始惑星系円盤	50,000	50,000	50,000	50,000	
サブ課題B	0	350,000	350,000	350,000	京都大学情報環境機構 スーパーコンピュータシステム (Gray XC-40) 海洋研究開発機構 地球シミュレータ (NEC SX-ACE)
岩石惑星	0	100,000	100,000	100,000	
ガス惑星	0	200,000	200,000	200,000	
惑星大気	0	50,000	50,000	50,000	
サブ課題C	430,000	430,000	430,000	430,000	名古屋大学情報基盤センター スーパーコンピュータシステム (FX100) 海洋研究開発機構 地球シミュレータ (NEC SX-ACE)
太陽対流層	300,000	300,000	300,000	300,000	
磁気リコネクション	100,000	100,000	100,000	100,000	
地球磁気圏	30,000	30,000	30,000	30,000	
サブ課題D	0	700,000	700,000	700,000	筑波大学計算科学研究センター 計算機システム (HA-PACS/TCA (PACS-VIII), COMA (PACS-IX)) 最先端共同HPC基盤施設 計算機システム (Oakforest-PACS)
量子化学計算	0	300,000	300,000	300,000	
ダスト計算	0	400,000	400,000	400,000	
合計	580,000	1,630,000	1,630,000	1,630,000	