

令和 3 年 6 月 14 日現在

機関番号：82706
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2018～2020
課題番号：18K03716
研究課題名（和文）輻射流体力学シミュレーションのためのオパシティおよび状態方程式計算コードの開発

研究課題名（英文）Development of a public code generating opacity and equation of state tables for radiation hydrodynamics simulations

研究代表者
廣瀬 重信（Hirose, Shigenobu）
国立研究開発法人海洋研究開発機構・付加価値情報創生部門・調査役

研究者番号：90266924
交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000円

研究成果の概要（和文）：天体物理学における輻射流体力学シミュレーションのためのオパシティテーブルを計算する公開コードOPTABを開発した。このコードは、現代のハイパフォーマンス・コンピューティングに合わせ Fortran 90で書かれており、MPIによる並列化、およびHDF5を用いた効率のよいI/Oを実現している。このコードの目的は、ユーザが自身の研究目的に合わせたオパシティテーブルを作ることができるプラットフォームを提供することにある。したがって、コードはユーザが自由に改変し、オパシティソースを変更できるようにデザインされていることが特徴である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

輻射流体力学シミュレーションは天体物理学の強力な研究手段であるが、そこで用いられるオパシティの計算は一般に複雑である。数値データとして公開されているものもあるが限定的であり、公開されている計算コードもFORTRAN77で書かれていてブラックボックスと化している。これに対し、本研究課題で開発したオパシティ計算コードは、Fortran 90を用いて可読性・可搬性に重点を置いて設計され、計算方法も論文で詳述されている。これらにより、非常に透明性の高い計算コードとなっている点が特徴である。この計算コードがコミュニティで共有されることにより輻射流体力学シミュレーションがさらに発展することが期待される。

研究成果の概要（英文）：We have developed a public code Optab that outputs Rosseland, Planck, and two-temperature Planck mean gas opacity tables for radiation hydrodynamics simulations in astrophysics. The code is developed for modern high performance computing, being written in Fortran 90 and using Message Passing Interface and Hierarchical Data Format, Version 5. The purpose of this work is to provide a platform on which users can generate opacity tables for their own research purposes. Therefore, the code has been designed so that a user can easily modify, change, or add opacity sources in addition to those already implemented, which include bremsstrahlung, photoionization, Rayleigh scattering, line absorption, and collision-induced absorption.

研究分野：天体物理学

キーワード：オパシティ 輻射流体力学 公開コード

1. 研究開始当初の背景

流体力学シミュレーションは、星形成過程から降着円盤、超新星爆発に至るまで、幅広い天体における非線形流体现象を理解するための強力な手段である。近年の計算機の発展によって輻射輸送を組み込んだ輻射流体力学シミュレーションも十分行える環境が整ってきており、そのシミュレーション手法の進歩も目覚ましい。実際、輻射輸送は天体における主要な熱輸送過程であるとともに観測手段でもあるため、天体现象の正確な理解のためには流体力学と輻射輸送を同時に計算することが本質的である。

しかし、輻射輸送を計算するために必要な輸送係数 = オパシティは、一般に原子物理の詳細に依存するため解析的な取り扱いが難しい。代わりに数値データとして提供されているものの、温度・密度域が限定的であり、またデータが更新されない場合や提供が中止されている場合もあるなど、必ずしも研究目的に合った数値データが入手できるとは限らない。

状態方程式も流体の熱力学に関わる重要な関係式であるが、その数値データの入手に関しては、オパシティと同様の困難がある。局所熱力学平衡を仮定した場合、オパシティの値は化学平衡から決まるその化学種の分圧に比例するので、本来状態方程式とオパシティは不可分の関係にある。しかし、オパシティとともに状態方程式の数値データが提供されることはほとんどない。

このようなオパシティや状態方程式の数値データの不備は、近年、輻射流体力学シミュレーションの研究対象が広がるにつれて顕著になってきている。シミュレーション手法の進歩によって輻射輸送そのものをより正確に解けるようになっても、不正確なオパシティや状態方程式に基づくものであれば、定性的にも誤った結論を導く可能性がある。散発的・限定的に公開されている数値データを利用せざるを得ない現状は、輻射流体力学シミュレーションを用いた研究の足枷となっている。

2. 研究の目的

そこで本研究では、ユーザーが指定した化学組成に基づき、より幅広い温度・密度域に対してオパシティと状態方程式を計算するコードの開発を行い、かつそれを一般に公開することを目的とした。これにより、ユーザーが研究目的に合ったオパシティと状態方程式の数値データを用いて輻射流体力学シミュレーションを行うことを可能とする。さらに本研究の計算コードでは、(中心星の照射加熱を受ける原始惑星系円盤や、大質量星形成における輻射フィードバックなど)ガス温度と外部輻射温度が異なる問題を扱うための二温度プランク平均オパシティや、ポストプロセス・観測的可視化に用いることが出来る単色オパシティ(=シミュレーションで用いた平均オパシティと整合的)も出力可能とする。

局所熱平衡を仮定した場合、(特殊な状況を除けば)状態方程式とオパシティの計算方法そのものは確立している。しかし、本研究のように、輻射流体力学シミュレーションを念頭に置いて、数値データを整備することは今まで行われてこなかった。これは、輻射流体力学シミュレーションがそれほど一般的でなく、数値データの入手に関しては場当たりの対応で済んできたことが要因である。しかし、今後、輻射流体力学シミュレーションによる研究がさらに発展していくためには、数値シミュレーション手法の進歩とともに、本研究のような基本的物理データの整備が必要不可欠である。

また、本研究では、既存の研究のように数値データだけを公開するのではなく、計算コード自体を公開することに重点を置いている。これは、上記の通り、ユーザーが研究目的に合った数値データを自由に作成できるようにするためであるが、それにより、本研究成果の数値データのユーザー数が増加することも期待している。そうなることで、各々の輻射流体力学シミュレーションの再現性が高まり、シミュレーション結果の公正な比較ができる環境がようやく整う。また、計算コードを公開しておくことで、本研究計画の終了後も、ユーザーコミュニティにおいて計算コードのさらなる発展や維持が可能となる。

3. 研究の方法

状態方程式とオパシティの計算には、主に恒星大気物理の分野において長い歴史とその間に蓄積された膨大なノウハウが存在する。限られた時間と人的資源で、白紙の状態から計算コードを完成させることは不可能に近い。また、任意の物理条件(温度・密度域)に対応させることも実際上難しい。

そこで本研究では、非公開恒星大気モデル計算コード Phoenix (Hauschildt 1992, JQSRT, 47, 433)における状態方程式とオパシティの計算部分を、基本的なアルゴリズムはそのままに、独立した計算コードとして組み直すという方針をとる。ただし、Phoenix ではロスランド平均オパシティとプランク平均オパシティだけを出力しているのに対し、本研究では、これらに加えて(オパシティと整合的な状態方程式も出力させるほか、(先に述べた通り)必要に応じて二温度プランク平均オパシティあるいは単色オパシティも出力できるようにする。また、最新の原子・分子の熱力学および光学データベースに基づいた数値データが得られるように、データベースはユーザーでも随時更新できるようにする。これらが達成された段階で成果を The Astrophysical

Journal Supplement Series 誌に投稿するとともに、計算コードを第一版としてウェブ上で公開することを目標とした。

(1) 研究計画の一部変更について

本研究課題申請時には、状態方程式コードと、その計算結果を用いたオパシティ計算コードの両方を開発する予定であったが、以下の理由からオパシティ計算コードの開発のみに絞った。まず、状態方程式に関しては既存の公開コードが複数存在する。それぞれの公開コードは異なる数値解法を採用しており一長一短がある。したがって、本研究課題で、特定の数値解法を採用した状態方程式コードを作るよりは、ユーザが自身の研究目的に合致した既存の状態方程式コードを用いた結果を採用するオパシティ計算コードを開発するほうが、結果としてユーザの利益になると判断した。

また、当初はダストオパシティも考慮する予定であったが、計算方法が確立している気相のオパシティのみを取り扱うことにした。これは、ダストオパシティには、ダストモデルや、ダストの存在量が気相の化学平衡に関わる度合いなど、フリーパラメータへの依存が大きいため。

4. 研究成果

(1) 完成したオパシティ計算コードの概要

オパシティ計算コードは、現代のハイパフォーマンスコンピューティングを十分活用できるよう、Fortran 90 で記述して MPI で並列化した。また、原子・分子の巨大なデータベースに関しては、頻繁なアクセスを効率よく行うために HDF5 フォーマットに予め変換しておく。

計算コードは、ユーザの用意した状態方程式の計算結果、オパシティソースデータファイル、パラメタファイルを読み込んだ後、連続スペクトル・線スペクトルを計算してその結果を HDF5 ファイルとして出力するというルーチンを、状態方程式のグリッド点に対して繰り返し行う。

本計算コードの目的は、特定の研究目的に対して完全なオパシティデータを出力することではない。むしろ、ユーザが自身の研究目的に合ったオパシティデータを自由に計算できるプラットフォームを目指したものである。したがって、個々のオパシティ計算はモジュール化し、ユーザが自由にオパシティソースを変更・追加できるようにコードの構造をデザインした。

(2) オパシティ計算の詳細

制動放射

原子イオンの制動放射に関しては van Hoof et al. (2014) の数値データを採用した。この他に、水素原子の負イオンと水素分子の負イオンに関する制動放射も取り入れた。

光電離

原子及び原子イオンに対する光電離に関しては Mathisen (1984) を参考にし、計 14 種 112 チャンネルの光電離過程を考慮した。この他に、水素原子の負イオンと水素分子に関する光電離過程も組み込んだ。

線吸収

原子及び原子イオンの線吸収に関しては Harvard CfA の Kurucz データベース、分子の線吸収に関しては Exomol データベースと HITRAN データベースに対応している。ユーザは、状態方程式で用いた化学種に対してどのデータベースを用いるかをパラメタファイルで指定する。ボトルネックとなる Voigt 関数の計算に関しては、Schreier (2018) が提供するコードを採用した。

Collision-induced absorption

HITRAN データベースが提供する数値データに対応しており、計 17 種類の衝突過程を組み込んだ。

散乱

トムソン散乱の他、基底状態の水素原子、水素分子、基底状態のヘリウム原子に関するレイリー散乱を組み込んだ。

(3) 計算時間短縮のための工夫

(2) で説明したオパシティ計算において最も計算時間がかかるのは 線吸収である。これは、トータルで 100 億以上に及ぶ原子・分子の遷移データに対して、与えられた波数グリッド点で Voigt 関数の評価をしなければならないからである。実際これには膨大な計算時間がかかる。そこで、以下のような工夫を行って計算時間の短縮を図った。すなわち、線スペクトルの背景となる連続スペクトルの強さを基準として、十分弱い遷移は無視し、中程度の強さの遷移に関しては線中心のみが寄与するとして (Voigt profile よりは計算時間のかからない) Gauss profile を採用した。この近似により、最終的に得られる全オパシティの計算精度を落とさずに、計算時間を 1/10 程度までに短縮することに成功した。

(4) コードパッケージと一般公開

メインのオパシティ計算コードとそれを実行させるために手引きに加え、オパシティ計算に必要なデータを取得するスクリプトや、原子・分子の巨大なデータベースを HDF5 に変換するプログラムを加えたものを、パッケージ「OPTAB」として GitHub で一般公開した。ユーザは必要に

応じてコードを自由に改変して実行することができる。

(5) 得られた成果の位置づけとインパクト

これまでのオパシティ計算コードは(その長い歴史から)FORTRAN77で書かれている。そのため可読性に劣っており、かつドキュメントもほとんどなかったため、ほとんどブラックボックスと化していた。これに対し、本研究課題で開発したオパシティ計算コードは、Fortran 90を用いて可読性および可搬性に重点を置いて設計されている。さらにAstronomy & Astrophysicsに投稿した原著論文(現時点では再投稿に向けてリバイズ中)において、計算方法を余すところなく詳述した。これにより、ユーザに対して透明性の高い計算コードとなっており、ユーザは自身が行った計算結果を完全に理解することが可能である。この計算コードがコミュニティで共有されることにより、研究目的にも書いたように、各々の輻射流体力学シミュレーションの再現性が高まり、シミュレーション結果の公正な比較ができる環境が整うことを期待する。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Hirose Shigenobu, Shi Ji-Ming	4. 巻 485
2. 論文標題 Non-linear outcome of gravitational instability in an irradiated protoplanetary disc	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Monthly Notices of the Royal Astronomical Society	6. 最初と最後の頁 266 ~ 285
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/mnras/stz163	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 該当する

1. 著者名 Coleman Matthew S. B., Blaes Omer, Hirose Shigenobu, Hauschildt Peter H.	4. 巻 857
2. 論文標題 Convection Enhances Magnetic Turbulence in AM CVn Accretion Disks	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Astrophysical Journal	6. 最初と最後の頁 52 ~ 52
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3847/1538-4357/aab6a7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件/うち国際学会 0件）

1. 発表者名 Shigenobu Hirose, Jiming Shi
2. 発表標題 Nonlinear outcome of gravitational instability in irradiated protoplanetary disks
3. 学会等名 日本地球惑星科学連合2019年大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 廣瀬重信、Peter Hauschildt、簗島敬、富田賢吾、佐野孝好
2. 発表標題 輻射流体力学シミュレーションのためのオパシティ計算コードの開発
3. 学会等名 日本天文学会2020年春季年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 廣瀬重信、Peter Hauschildt、簗島敬、富田賢吾、佐野孝好
2. 発表標題 輻射流体力学シミュレーションのためのオパシティ計算コードの開発 II
3. 学会等名 日本天文学会2021年春季年会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	簗島 敬 (Minoshima Takashi) (00514811)	国立研究開発法人海洋研究開発機構・付加価値情報創生部門 (数理科学・先端技術研究開発センター)・副主任研究員 (82706)	
研究分担者	富田 賢吾 (Tomida Kengo) (70772367)	東北大学・理学研究科・准教授 (11301)	
研究分担者	佐野 孝好 (Sano Takayoshi) (80362606)	大阪大学・レーザー科学研究所・助教 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------