

[研究開発公募の成果]

宇宙論的構造形成シミュレーションコードの開発

野口 正史

東北大学大学院理学研究科天文学専攻

宇宙初期における天体の形成過程の解明は現在の天体物理学の最も重要な課題の一つである。この問題を扱う最も強力な手法は宇宙論的構造形成シミュレーションである。本研究開発では、宇宙初期に重要である物理過程を選択的に取り入れた簡単なシミュレーションコードを作成した。

1. 宇宙論的数値シミュレーション

銀河や銀河団など宇宙の多くの天体は、宇宙初期の密度揺らぎが重力不安定によって成長して形成されたと考えられている。宇宙論的数値シミュレーションとは、宇宙のある代表的な領域（立方体や球体）を切り出し、初期条件としてその中の物質に適切な揺らぎを与え、さまざまな物理過程を考慮しつつ、膨張宇宙における揺らぎの時間発展を計算していく方法である。この方法は素朴であるが、本質的に非線型である天体の形成過程を幾何学的対称性などの制約なしに追跡できる最も忠実な手法と言える。

本研究開発では、Kawata と Gibson[1]による GCD+コードに修正と拡張を加えて初期宇宙のシミュレーションに適したコードを作成した。本コードでは、宇宙の物質成分として、ダークマターとバリオンを考え、与えられた初期条件のもとで、これらの進化をシミュレートする。ダークマターは重力のみが作用する無衝突粒子として N 体シミュレーションで扱う。バリオンはガスと sink particle から成り、ガスは Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)法で取り扱う。SPH 法は、以下に述べるように、連続体としてのガスを粒子の集団でモデル化する方法である[2]。ガスの密度、温度、圧力、化学組成などはすべて個々の SPH 粒子の属性として表現される。また、コードにはガスの冷却と非平衡の化学反応が組み込まれている。ガス密度が局所的に非常に大きくなると、冷却時間が短くなり、そのためにシミュレーションが進まなくなる。Sink particle はある密度以上のガス粒子を無衝突粒子に転換して、この数値的な困難を除くために導入するが、物理的には星形成に対応するものと考えられることができる。

本コードは水素分子や重水素分子の生成・消滅、それらによる冷却過程などを組みこんだ半面、超新星爆発などによる重元素放出や加熱は考慮していない。したがって、宇宙初期の天体形成をシミュレートするのに適したコードであり、Population I や II の星生成や、それらを基盤とした大質量銀河の形成など、宇宙後期における重元素による冷却が本質的な現象には向いていない。また、後述するように周期的境界条件には対応していない。

2. Tree-SPH 法

本コードでは粒子に作用する重力は Tree 法によって計算する。Tree 法は次のような考え方に基づいている。ある粒子に作用する重力を近傍粒子による成分と遠方粒子による成分に分けて考える。前者は近傍粒子の偶然的な配置によって大きく変化する可能性があるため個々の粒子からの寄与をきちんと計算して足し合わせる。それに対して、遠方粒子は、お互いに近距離にある複

数個の粒子をまとめて一つのグループとし、グループからの寄与として重力を計算する。このグループ化は階層的に実行でき、近傍粒子は1個の粒子からなるグループと考えることができる。この手法により、 N 個の粒子間に働く重力を計算するための演算の回数を、素朴にすべての粒子ペアについて計算する場合に必要な N^2 のオーダーから、 $N \log N$ のオーダーに減らすことができる。本コードにおけるTree法はBarnesとHutの方法[3]によった。

本コードでは、ガスは理想気体と仮定し、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法を用いてシミュレーションを行う。SPH法では、ガスは多数の粒子の集合体としてモデル化され、ガス密度など粒子に付随する局所的物理量はカーネルを使って、近傍粒子 (neighbors) からの寄与を考慮して計算される。たとえば、 j 番目のSPH粒子のsmoothing length h_j とカーネル W を使って、 i 番目の粒子の密度は

$$\rho_i = \sum_j m_j W(r_{ij}, h_{ij})$$

と表される。ここで m_j は j 番目の粒子の質量、 $r_{ij} = |x_i - x_j|$ 、 $h_{ij} = \frac{h_i + h_j}{2}$ である。カーネルは

$$W(r, h) = \frac{8}{\pi h^3} \times \begin{cases} 1 - 6(r/h)^2 + 6(r/h)^3 & \text{if } 0 \leq r/h \leq 1/2, \\ 2[1 - (r/h)]^3 & \text{if } 1/2 \leq r/h \leq 1, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

とした[4]。

i 番目の粒子の運動方程式は

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = -\frac{1}{\rho_i} \nabla_i (P + P_{visc}) - \nabla_i \Psi_i$$

となる。ここで、 \mathbf{v} 、 Ψ 、 P 、 P_{visc} はそれぞれ、速度、重力ポテンシャル、圧力、artificial viscous pressure である。圧力勾配は

$$\frac{1}{\rho_i} \nabla_i (P + P_{visc}) = \sum_j m_j \left(\frac{P_i}{\rho_i^2} + \frac{P_j}{\rho_j^2} + Q_{ij} \right) \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij})$$

で計算される[4]。ここで

$$Q_{ij} = \frac{-\alpha c_{s,ij} \mu_{ij} + \beta \mu_{ij}^2}{\rho_{ij}}$$

であり、また

$$\rho_{ij} = \frac{\rho_i + \rho_j}{2}, \quad c_{s,ij} = \frac{c_{s,i} + c_{s,j}}{2},$$

$$\mu_{ij} = \frac{0.5h_{ij}v_{ij} \cdot x_{ij}}{r_{ij}^2 + \eta^2} \quad \text{for } (x_{ij} \cdot v_{ij} > 0), \quad =0 \quad \text{otherwise}$$

と定義した。ただし、 $x_{ij} \equiv x_i - x_j$ および $v_{ij} \equiv v_i - v_j$ 。ここでは、過去のテスト計算から推奨される、 $\alpha = 0.5$ 、 $\beta = 1.0$ 、 $\eta = 0.05h_{ij}$ という設定を用いる。さらに Navarro と Steinmetz [5] によって推奨されている修正、

$$Q_{ij} \rightarrow Q_{ij} \frac{f_i + f_j}{2}$$

を行った。ただし、

$$f_i = \frac{|\langle \nabla \cdot v \rangle_i|}{|\langle \nabla \cdot v \rangle_i| + |\langle \nabla \times v \rangle_i| + 0.0002c_{s,ij} / h_{ij}}$$

i 番目の粒子の速度の発散と回転は、

$$\begin{aligned} \langle \nabla \cdot v \rangle_i &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) \\ \langle \nabla \times v \rangle_{i,x} &= -\frac{1}{\rho_i} \sum_j m_j [v_{ij,z} \nabla_{i,y} W(x_{ij}, h_{ij}) - v_{ij,y} \nabla_{i,z} W(x_{ij}, h_{ij})] \end{aligned}$$

によって評価される。ここで $v_{ij,x} \equiv v_{i,x} - v_{j,x}$ 。

i 番目の粒子に作用する重力は

$$\nabla_i \Psi = -G \sum_j \frac{m_j x_{ij}}{(r_{ij}^2 + \varepsilon_{ij}^2)^{3/2}}$$

ここで ε は softening length であり、 ε_{ij} は i 粒子と j 粒子の softening length の平均である。 i 番目の粒子の内部エネルギー u_i の時間発展は

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{P_i}{\rho_i^2} \sum_j m_j v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_j m_j Q_{ij} v_{ij} \cdot \nabla_i W(x_{ij}, h_{ij}) - \frac{\Lambda_i}{\rho_i}$$

によって計算される[4]。ここで、 Λ_i / ρ_i は単位質量あたりの冷却率である。

それぞれの粒子が常にほぼ等しい数の neighbor を持つようにするため、 $n+1$ ステップにおける粒子の smoothing length h^{n+1} は n ステップにおける粒子の smoothing length h^n から[1]の方法によってアップデートする。ただし h の下限として 10^{-6} シミュレーション単位を設定した。また softening length はダークマターでは $\varepsilon = 0.2h$ 、SPH 粒子では $\varepsilon = 0.05h$ とし、neighbor 数は 40 にした。

粒子の位置と速度は運動方程式を leap-frog 法で積分することによってアップデートする。その際のタイムステップの大きさは粒子によって異なり (individual timesteps)、 i 番目の SPH 粒

子のタイムステップは $\Delta t_i = \min(0.3\Delta t_{CFL,i}, 0.1\Delta t_{f,i})$ によって決める。ただし、Courant-Friedrichs-Lewy condition によるタイムステップは、

$$\Delta t_{CFL,i} = \frac{0.5h_i}{c_{s,i} + 1.2(\alpha c_{s,i} + \beta \max_j |\mu_{ij}|)}$$

で与えられ、また、1ステップの間に重力があまり大きく変化してはいけないという条件によって

$$\Delta t_{f,i} = \sqrt{\frac{h_i}{2} \left| \frac{dv_i}{dt} \right|^{-1}}$$

が定義される。 Δt_i があまりに小さくなるのを防ぐためにさらに下限を 10^{-8} シミュレーション単位に設定した (common.f 中の timemin)。ダークマター粒子および sink particle については $\Delta t = \min[0.16(\varepsilon/v), 0.4(\varepsilon/|dv/dt|)^{1/2}]$ と設定した。

一般に放射冷却のタイムスケールは、力学的タイムスケールに比べてはるかに小さい。そこでエネルギー方程式は、その時点における最小のタイムステップを用い、semi-implicit な方法で解く[6]。

本コードでは、質量は 10^{12} 太陽質量、長さは 100kpc、時間は 4.71×10^8 yr、温度は 10^4 K、密度は 6.77×10^{-26} gcm⁻³、速度は 207.4kms⁻¹、をシミュレーション単位としている。

3. 非平衡反応ネットワーク

Cold Dark Matter 宇宙では最初に小さいスケールの揺らぎが自己重力によってコラプスしてダークマターのハローを形成し、これらが合体をくり返しながら順次大きな質量のハローを形成していく。宇宙初期に形成される質量が 10^8 太陽質量以下のハローではコラプスの際にガスの温度は 10^4 K に到達せず、宇宙で一番豊富に存在する水素原子による冷却は行われぬ。これらの小質量ハローでは水素分子と重水素分子だけが冷却材として作用し得る。

これらの分子の生成と消滅を追跡するため、本シミュレーションコードでは、物質の化学成分として H、H⁺、H⁻、H₂、H₂⁺、D、D⁺、D⁻、HD、HD⁺、He、He⁺、He⁺⁺、そして自由電子 e の時間発展を計算する。つまりすべての SPH 粒子はこれら各成分の個数密度をその属性として持ち、その値は設定した化学反応にしたがって時間的に変化する。考慮した反応および採用した反応率の出典を付録に示した。

これらの反応のタイムスケールは力学時間に比べて一般に非常に短いので、化学平衡は必ずしも成立しない。各成分の個数密度の変化を計算するため、時間積分は backward difference formula (BDF)を用いて以下のように行う[7]。i成分の個数密度 n_i の時間発展が

$$\frac{dn_i}{dt} = -Dn_i + C$$

で与えられているとする。ここで C と D は温度および他の成分の個数密度の関数であり、それぞれ i 成分を生成する反応と破壊する反応をまとめて表したものである。この式の右辺を新しいタイムステップで評価すると、差分方程式は

$$n_i^{new} = \frac{C^{new} \Delta t + n_i^{old}}{1 + D^{new} \Delta t}$$

となる。 C^{new} と D^{new} はまず古いタイムステップの個数密度を代入して計算するが、新しいタイムステップにおける個数密度が求められた成分については順次その値を代入する。本コードは各成分は次の順序でアップデートしている：e、 H^+ 、 H^- 、 H_2 、H、 D^+ 、HD、D。これらのうち、 H^- 、 H_2 の量を決める反応は非常に速いので、これらの個数密度は平衡状態の値を使用する。また水素原子の個数密度は $n_H = n_p - n_{H^+}$ で与えられると仮定した。ここで n_p は水素原子核の個数密度

である。また D^+ 、HD も平衡値を使用し、 $n_D = n_d - n_{D^+}$ を仮定する。ここで n_d は重水素原子核の個数密度である。積分の時間刻み Δt は電子密度 n_e の変化率から次のように計算する。

$$\Delta t = \varepsilon \frac{n_e}{\left(\frac{dn_e}{dt} \right)} \quad (\varepsilon = 0.1)$$

BDF 法は semi-implicit なスキームであり、その数値的安定性は確認されている。

冷却過程は、水素とヘリウムの collisional excitation (+ionization) cooling、recombination cooling を主に[8]、すべてのイオンの Bremsstrahlung を [9]、 H_2 による冷却を [10]、HD による冷却を[11]に基づいて計算している。

4. 星形成 (Sink Particle の形成)

構造形成が進行するにつれ、ガスには局所的に密度の高い領域が現れる。そこでは冷却時間が非常に短くなるので、シミュレーションそのものが遅くなり実質的に停止してしまう。しかし、これは必ずしもシミュレーションの破綻を意味するものではない。実際にはガス密度がある程度高くなるとそこで星形成が起こり、その結果ガスは消費されてガス密度は低下すると考えられる。この考えにしたがって、密度が一定値 ρ_{sink} 以上の SPH 粒子を sink particle に転換する。Sink particle は重力以外の相互作用を行わない。ガスの sink particle への転換は原始ガス（重元素で汚染されていないガス）からの宇宙初代の星 (Population III) の形成に対応すると理解できる。

Population III の星は質量が太陽の 100 倍以上で多量の紫外線を放出すると考えられる。そのため、周囲のガスを電離し、その後の宇宙の進化に大きな影響を与えると考えられる。プログラムでは、sink particle の周囲のガスを、紫外線の量に応じて電離するようにした。そのために次のように電離領域の大きさを決める。まずその寿命 t_* の間に星が立体角 $d\Omega$ に放出する電離光子の総数は、星が単位時間に放出する電離光子の数を Q_{ion} とすると $N_{ion} = Q_{ion} t_* \frac{d\Omega}{4\pi}$ となる。一方星からの距離が r から $r + dr$ までの体積において起こる再結合の回数は

$N_{rec} dr = \alpha_B n_p^2 r^2 dr d\Omega$ と書ける。ここで $\alpha_B = 2.6 \times 10^{-13} \text{ (cm}^3\text{s}^{-1}\text{)}$ は case B recombination coefficient である。与えられた方向における電離領域の半径 r_{ion} は関係式 $\int_0^{r_{ion}} N_{rec} dr = N_{ion}$ によって計算される。Population III からの放射は等方的であると仮定しているので N_{ion} は方向によらないが、 N_{rec} は近傍のガス分布に応じて一般には方向に依存する。つまり、ガスが希薄な方向ほど sink particle からより遠距離まで電離されるという自然なレシピとなっている。プログラムでは、その方向 r_{ion} 以内のガスを完全に電離し、水素分子と重水素分子はともに完全に破壊した。またガスの温度は、電離水素ガスが放射冷却で到達できる下限の 10^4 K に設定した。電離光子の数は $Q_{ion} = 10^{50} \text{ sec}^{-1}$ を採用し、 $t_* = 3 \times 10^6 \text{ yr}$ の間電離が続くと仮定した。

5. 計算例

本シミュレーションコードを用いた計算例を図 1 と図 2 に示す。宇宙モデルとしては $\Omega_0 = 0.268$ 、 $\Omega_\Lambda = 0.732$ 、 $H_0 = 71 \text{ kms}^{-1}\text{Mpc}^{-1}$ 、 $\Omega_b = 0.044$ の Λ CDM モデルを用いた。シミュレーション領域は共動半径 (comoving radius) が約 0.4 Mpc の球である。粒子数はダークマター、SPH 粒子とも 435264 である。シミュレーションは赤方偏移 $z = 82.7$ の時点からスタートした。また ρ_{sink} は 20 シミュレーション単位に設定した (common.f 中の rho_sink で設定)。図は $z = 15.4$ の状態を示す。図 1 のスナップショットでは各 SPH 粒子は水素分子の質量比 f_{H_2} によってカラー表示されており、 $f_{H_2} < 10^{-7}$ の粒子は青で、 $f_{H_2} > 10^{-5}$ の粒子は赤で示されている。また黒丸は sink particle を示す。ガス密度の高い場所は水素分子が豊富に分布しており、特に高密度の場所で星形成が起こったことがわかる。また、sink particle の影響で、近傍のガスは電離され、水素分子が減少していることも見て取れる。

図 2 は水素分子の質量比 f_{H_2} をガス密度 n_p に対してプロットしたものである。ガスが高密度になるにつれ全体的に水素分子の比率が高くなる様子が分かるが、この相関から外れて小さい f_{H_2} を持つ SPH 粒子が少数存在することが分かる (赤線枠内)。これは sink particle の周囲の電離領域に存在する粒子であり、電離により一旦は水素分子が完全に消失したが、その後豊富に存在する自由電子を触媒として再び水素分子を作ったものである。このようなガスは、再結合が進んで電離領域が消失した後に、第二世代の星を形成する原料となる可能性がある。

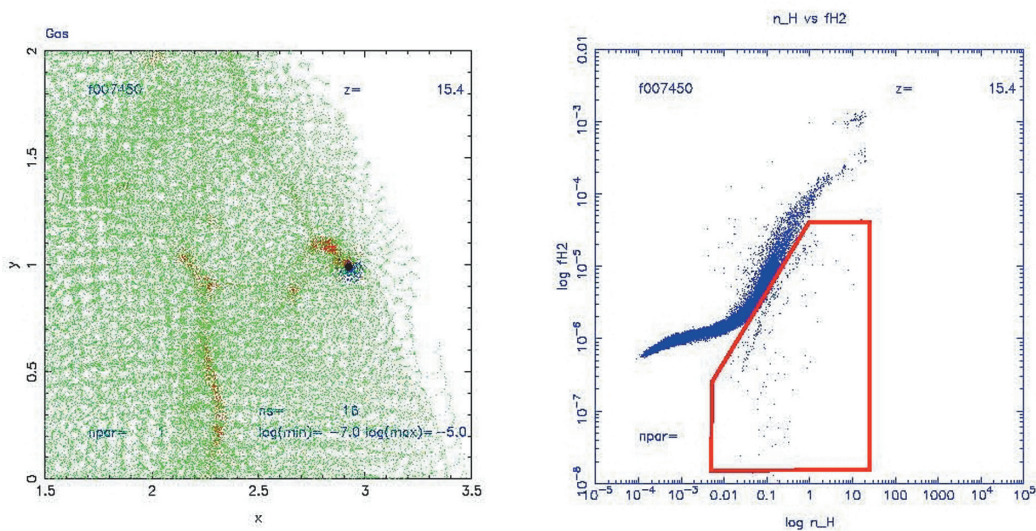
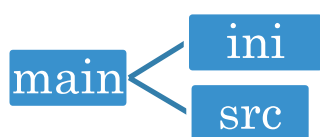


図1 (左) : SPH 粒子の空間分布。長さの単位は共動座標で 100kpc である。図2 (右) : 水素分子の質量比のガス密度に対する変化。ガス密度の単位は 水素原子核数/cm³ である。

6. コードの使用法

6.1 プログラムのダウンロードとコンパイル

本シミュレーションコードは Fortran 77 で書かれており、MPI(Message Passing Interface) を用いて並列化されている。必要なファイルは、gen.isc.tohoku.ac.jp の `/usr/ap/COSMO-ST-SIMU/cosmology.tar.gz` にある。これをダウンロードし、「`tar -xvf cosmology.tar.gz`」として解凍する。解凍するとファイルは次のようなディレクトリに展開される。以下、具体的な説明を行うが、`main` ディレクトリの `README` ファイルも合わせて参照されたい。また、`std.sample` は後で述べるプログラムテスト用の標準出力サンプルである。



ディレクトリ `ini` は後で述べる入力ファイルが置かれる場所である。解凍した段階ではプログラムのテスト用のサンプルが入っている。ディレクトリ `src` はプログラムのソースを格納する場所で、ここでコンパイルを行う。コンパイルは「`make sph`」と入力するだけである。コンパイルが完了すると実行形式 `cosuv` が `main` ディレクトリに作られる。プログラムの実行は `main` ディレクトリからシェルスクリプトで行う。シミュレーション実行前に `main` の下に計算結果を出力するための `output` ディレクトリを作っておく。

要求した CPU 時間でシミュレーションが完了しない場合、コードは継続計算のための情報を `cont.dat` と `pcont.dat` というファイルで、ディレクトリ `output` に出力する。ジョブを継続するには、ディレクトリ `src` で「`make sphc`」としてコンパイルを行い、作られた継続計算用の実行

形式 `cosuvc` を `main` ディレクトリから実行する。するとプログラムは `cont.dat` と `pcont.dat` を読み込み、継続シミュレーションを開始する。CPU 時間はメインプログラムの変数 `JOBTIME` を秒単位で指定して決める。経過 CPU 時間が (`JOBTIME-MARGIN`) になると停止し、それ以降は `cont.dat` と `pcont.dat` の書き出しに入る。

6.2 入力ファイル

以下の入力ファイルが必要である。入力ファイルはディレクトリ `ini` に置かれる。

- (1) **input.dat** : シミュレーションを制御するパラメータを与える。

このファイルはサブルーチン `set_ini` で読み込まれる。書式は次のとおりである。

1行目

`Ini_hyd` : 0 ならばダークマターのためのシミュレーション、0 以外ならばダークマター+SPH 粒子のシミュレーションを行う。

`Ini_mul` : シミュレーションのレベル数を与える。本コードでは 0 を指定する。

`SI_flgac` : 0 ならばガスの冷却を考慮し、1 ならば無視する。

`SI_flags` : 0 ならば `sink particle` を作成し、1 ならば作成しない。

`SI_flagfd` : 本コードでは 1 を指定する。

`SI_flagrad` : 本コードでは 1 を指定する。

`SI_flaghd` : 0 ならば重水素原子核を含んだ化学成分を考慮し、1 ならば無視する。

2行目

`Modstep` : 出力ファイルを書きだす間隔をタイムステップ数で指定する。サンプルでは 20 ステップ毎に出力する設定になっている。

3行目

`Gam` : ガスの比熱比。

`Ini_OMGg` : 初期状態 (`sink particle` が存在しない状態) でのガスの質量比 (=ガスの質量 ÷ (ガスの質量+ダークマターの質量))。

4行目

`Ini_ze` : シミュレーションを終了する赤方偏移。

5行目

`Ini_T0` : ガスの初期温度。単位は 10^4 K。

6行目以降 (1行ずつ)

上から順に、`e`、`H`、`H+`、`H-`、`H2+`、`H2`、`He`、`He+`、`He++`、重水素原子核、`D`、`D+`、`D-`、`HD`、`HD+` の個数密度の初期値を全プロトンの個数密度に対する比で与えるものである。サンプルは一例であり、宇宙モデルもしくはシミュレーション開始時点が異なる場合は、それに応じて変更しなければならない (後述)。

- (2) **level0d.dat** : ダークマターの初期条件を与える。

サブルーチン `set_ini` で読み込まれる。

1行目 (フォーマットは 「5(1pE13.5)」)

`dx` : ダークマター粒子の位置を設定したときのメッシュサイズ (単位は `comoving Mpc`)。

初期の座標を決めるにあたって、まず各ダークマター粒子が格子サイズ（隣り合う粒子の距離） dx の立方格子に位置している状態を考える。これは密度揺らぎが存在しない状態に対応する。各粒子の実際の座標は密度揺らぎの大きさにしたがってこの位置からわずかにずれる。 dx はサブルーチン `set_ini` の中で粒子の質量を計算するのに用いられる。また、シミュレーション領域は必ずしも格子を設定した立方体領域と等しくなくとも良い。サンプルファイルで与えたように、立方体領域から切り出した球など任意の部分空間を設定できる。

SI_a : シミュレーション開始時の宇宙のスケールファクター。

SI_omg0 : 物質(ダークマター+SPH 粒子)の密度パラメータ Ω_0 。

SI_lam0 : 宇宙定数の密度パラメータ Ω_Λ 。

SI_h0 : ハッブル定数 H_0 (単位は $\text{kms}^{-1}\text{Mpc}^{-1}$)。

2行目以降 (フォーマットは「6(1pE13.5)」)

各ダークマター粒子の密度揺らぎを考慮した座標 x , y , z , とそれぞれの方向の速度 vx , vy , vz 。座標の単位は `comoving Mpc` であり、速度は初期時刻における `peculiar velocity` (ハッブル膨張からのずれ) を kms^{-1} 単位で与えるものである。

- (3) **level0p.dat** : SPH 粒子の初期条件を与える。ダークマターのためのシミュレーションを行う場合は不要である。サブルーチン `set_ini` で読み込まれる。

1行目は `level0d.dat` と同じ。

2行目以降 (フォーマットは「6(1pE13.5)」)

各 SPH 粒子の座標 x , y , z , とそれぞれの方向の速度 vx , vy , vz 。

6.3 出力ファイル

計算結果は以下のファイルに出力される。

- (1) **標準出力** (main ディレクトリに出力される。)

装置番号6番 (`write(6,*)`) の出力である。シミュレーションのログとして、各タイムステップにおける基本情報 (粒子数やタイムステップの大きさ等) が出力される。特に注意を払う必要はないが、ジョブが異常終了した場合にはエラーメッセージが出力される。

- (2) **d******* (ディレクトリ `output` に出力される。)

サブルーチン `analysys` で出力される。ダークマターのデータを出力する。***** はタイムステップを6桁の数字で表示し、たとえば3400ステップ目のデータであれば、`d003400` というファイル名になる。

1行目は、ガス粒子数、ダークマター粒子数 `ndm`, `sink particle` 数、スケールファクターが出力される。フォーマットは「*」。

2行目から(ndm+1)行目は各ダークマター粒子について座標 x , y , z , それぞれの方向の速度 vx , vy , vz , 質量 m , ソフトニングサイズ ϵ を出力する。フォーマットは「8E13.5」であり、各量の単位はシミュレーション単位である (2章参照)。

- (3) **b******* (ディレクトリ `output` に出力される。)

サブルーチン `analysys` で出力される。SPH 粒子および `sink` 粒子のデータを出力する。ファイル名は `d*****` と同じ仕方で命名される。

1行目はガス粒子数 ng 、ダークマター粒子数 ndm 、sink particle 数 ns 、スケールファクター、宇宙時間（ビッグバンから経過した時間で単位はシミュレーション単位）を出力する。フォーマットは「*」。

2行目から $(ng+1)$ 行目までは各 SPH 粒子について x 、 y 、 z 、 vx 、 vy 、 vz 、質量、密度、ダミー、smoothing length、 ts （後述）、ダミー、ダミー、ダミー、それ以降順に、 e 、 H 、 H^+ 、 H^- 、 H_2 、 H_2^+ 、 He 、 He^+ 、 He^{++} 、 D 、 D^+ 、 D^- 、 HD 、 HD^+ のバリオンに対する質量比、ダミー を出力する。フォーマットは「13d13.5, i10, 14d13.5, i10」。

$(ng+2)$ 行目から $(ng+ns+1)$ 行目までは sink particle について同じ変数を出力する。11 番目の変数 ts は SPH 粒子については意味がないが、sink particle については SPH 粒子から sink particle に転換した時刻（シミュレーション単位）を与える。

6.4 プログラムの動作テスト

ダウンロードしたファイルにはテスト用の入力ファイルがサンプルとして含まれている。これを使用してシミュレーションを実行し、標準出力をサンプル `std.sample` と比較することで簡単なチェックができる。詳しい説明は README にある。

6.5 注意

継続シミュレーションを行う場合、シミュレーションのパラメータは `input.dat` から読み込まれるので `input.dat` は変更しないことを推奨する。粒子の情報は、`cont.dat` と `pcont.dat` から読み込まれるのでそれまでに出力された計算結果（“d*****” や “b*****”）は必要ない。

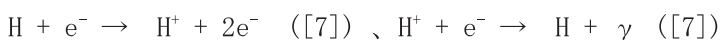
本コードはたとえそれがどんなに非現実的なものであっても与えられた任意の初期条件のもとにシミュレーションを実行できる。しかし、物理的に意味のある結果を得るためには宇宙論的に整合性のある初期条件を設定する必要がある。そのためのプログラムとして、化学組成の初期値については <http://www.astro.ubc.ca/people/scott/recfast.html> にある RECFAST を、粒子の位置と速度の初期条件については <http://ascl.net/cosmics.html> にある COSMICS を使用することを勧める。また周期的境界条件には対応していないので、シミュレーション領域は球状に設定するのが望ましい。

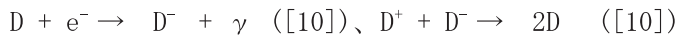
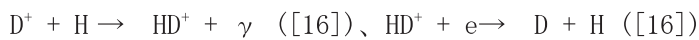
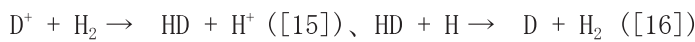
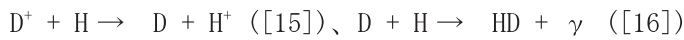
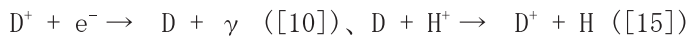
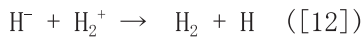
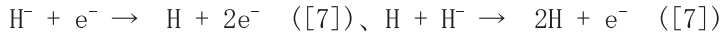
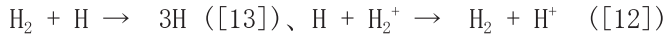
謝辞

本研究は、プログラムの要求する速度とメモリ容量の制限により通常の PC では実行が困難であったが、東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用することで実現することができた。また、Mullard Space Science Laboratory の河田大介氏には GCD+ の使用を快諾していただいたほか、有益な助言をいただいた。

付録

本コードで採用した化学反応とその反応率の出典（括弧内）は次のとおりである。





参考文献

- [1] D. Kawata, and B.K. Gibson, *MNRAS*, 340, 908 (2003)
- [2] R.A. Gingold, and J.J. Monaghan, *MNRAS*, 181, 375 (1977)
- [3] J.E. Barnes, and P. Hut, *Nature*, 324, 446 (1986)
- [4] M. Steinmetz, *MNRAS*, 278, 1005 (1996)
- [5] J.F. Navarro, and M. Steinmetz, *Astrophys.J.*, 478, 13 (1997)
- [6] L. Hernquist, and N. Katz, *Astrophys.J.Suppl.*, 70, 419 (1989)
- [7] V. Bromm, P.S. Coppi, and R.B. Larson, *Astrophys.J.*, 564, 23 (2002)
- [8] R. Cen, *Astrophys.J.Suppl.*, 78, 341 (1992)
- [9] J.H. Black, *MNRAS*, 197, 553 (1981)
- [10] D. Galli, and F. Palla, *Astron. Astrophys.*, 335, 403 (1998)
- [11] D.R. Flower, J. Le Bourlot, G. Pineau des Forets, and E. Roueff, *MNRAS*, 314, 753 (2000)
- [12] T. Abel, P. Anninos, M.L. Norman, and Y. Zang, *New Astronomy*, 2, 181 (1997)
- [13] S. Lepp, and J.M. Shull, *Astrophys.J.*, 270, 578 (1983)
- [14] P.R. Shapiro, and H. Kang, *Astrophys.J.*, 318, 32 (1987)
- [15] D. Galli, and F. Palla, *Planetary and Space Sci.*, 50, 1197 (2002)
- [16] P.C. Stancil, S. Lepp, and A. Dalgarno, *Astrophys.J.*, 509, 1 (1998)