

## 0.1 基礎方程式

$$\partial_t \vec{U}(t, x) + \partial_x \vec{F}_x = 0, \quad (1)$$

$$\vec{U} = (\rho, \rho v_x, \rho v_y, \rho v_z, E, B_x, B_y, B_z)^t, \quad (2)$$

$$\vec{F}_x = \begin{pmatrix} \frac{\rho v_x}{G} \\ \frac{\rho v_x^2 + p + \frac{B_y^2 + B_z^2}{2} - \frac{B_x^2}{2}}{G} \\ \frac{\rho v_y v_x - B_y B_x}{G} \\ \frac{\rho v_z v_x - B_z B_x}{G} \\ \frac{(E + p + \frac{B_y^2 + B_z^2}{2}) v_x - (\frac{B_x v_x}{2} + B_y v_y + B_z v_z) B_x}{G} \\ 0 \\ \frac{v_x B_y - v_y B_x}{G} \\ \frac{v_x B_z - v_z B_x}{G} \end{pmatrix}_M, \quad (3)$$

$$(4)$$

where,

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{\rho v^2 + B^2}{2} \quad (5)$$

$$(6)$$

## 0.2 Godunov MOC 法

このコードではフラックスを上式の下線のように  $G$  と  $M$  の部分に分離して解いていく。 $G$  の部分はリーマン問題を厳密に解く Full Godunov 法 (van Leer 1979, Sano et al. 1999)、 $M$  の部分は MOC (Stone & Norman 1992) で解く。 $G$  と  $M$  の部分は Lagrange 座標で解き、その後 Euler 座標で計算する場合には元の Euler 座標へ remap する。

### 0.2.1 Lagrangian Evolution

$G_x$  の部分を質量座標 ( $dm = \rho dx$ ) で書くと、

$$\frac{D}{Dt} \left( \frac{1}{\rho} \right) = \frac{\partial v_x}{\partial m}, \quad (7)$$

$$\frac{D v_x}{Dt} = \frac{\partial P}{\partial m}, \quad (8)$$

$$\frac{D v_{y,z}}{Dt} = 0, \quad (9)$$

$$\frac{D e}{Dt} = \frac{\partial P v}{\partial m}, \quad (10)$$

where

$$P = p + \frac{B_y^2 + B_z^2}{2}, \quad (11)$$

$$e = \frac{p}{(\gamma - 1) \rho} + \frac{\rho v^2 + B^2}{2 \rho}. \quad (12)$$

厳密にはこれらと誘導方程式の第一項： $\partial B_{y,z} / \partial t + \partial (v_x B_{y,z}) / \partial x = 0$  を同時に解く。第二項は磁気張力と共に  $M_x$  の部分で解く。この方程式系を 1 次元的に時間発展させるためにはセル境界で  $P$  と  $v_x$  が分かれば良いので、それらをリーマン問題 (衝撃波管問題) の厳密解から求める。この発展の概念図を図 1 に示す。

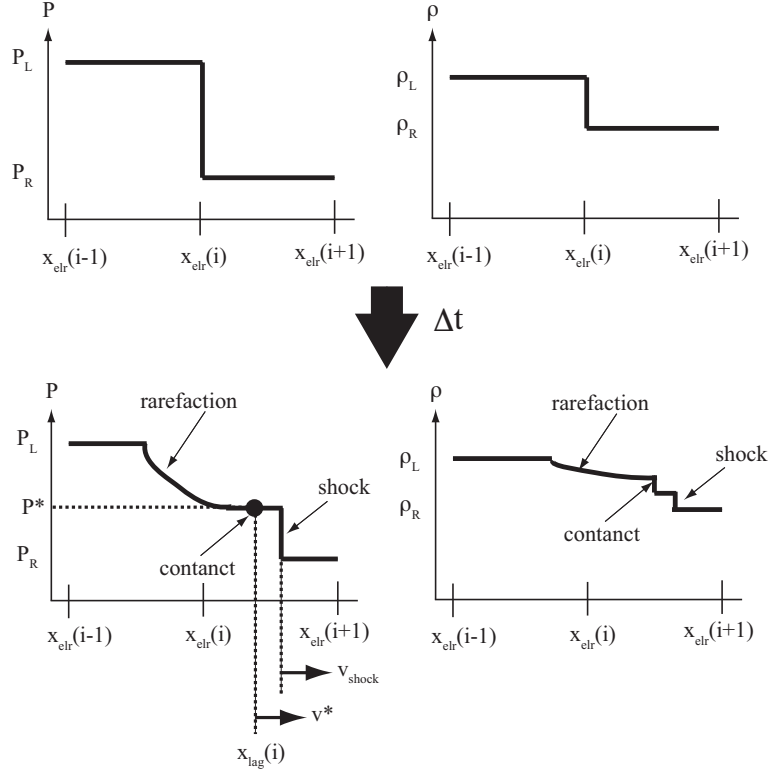


Figure 1: リーマン問題 (衝撃波管問題).

セル境界での  $P$  と  $v_x$  ( $P^*$  と  $v_x^*$  と書く) が求まると、次の時刻の物理量は以下の差分式から求まる (誘導方程式の部分は連続の式と同じ形なので同じ形で発展する)。

$$m_i^n = \rho_i^n (x_{\text{elr},i} - x_{\text{elr},i-1}) \quad (13)$$

$$x_{\text{lag},i} = x_{\text{elr},i} + v_{x,i}^* \Delta t, \quad (14)$$

$$\rho_i^{n+1} = \frac{m_i^n}{x_{\text{lag},i} - x_{\text{lag},i-1}}, \quad (15)$$

$$v_{x,i}^{n+1} = \frac{P_i^* - P_{i-1}^*}{m_i^n}, \quad (16)$$

$$e_i^{n+1} = \frac{v_i^* P_i^* - v_{i-1}^* P_{i-1}^*}{m_i^n}, \quad (17)$$

$$B_{y,z,i}^{n+1} = \frac{B_{y,z,i}^n (x_{\text{elr},i} - x_{\text{elr},i-1})}{x_{\text{lag},i} - x_{\text{lag},i-1}}, \quad (18)$$

この後、今の Lagrange 座標のまま MOC を用いて  $M_x$  部分による発展で  $v_{x,y,z}$ ,  $E$ ,  $B_{y,z}$  に補正を加える。

### 0.2.2 Remapping

次に求まった Lagrange 座標での物理量を元の Euler 座標に張り直す。張り直す際には基本変数を保存量  $\vec{U}$  に変換する (Lagrangian evolution で発展させた量は  $\rho$ ,  $\vec{v}$ ,  $e$ )。すると、Lagrange 的に発展させた時間  $\Delta t$  の間に元の Euler 座標でのセルの境界  $x_{\text{elr},i}$  から出て行った保存量は

$$\Delta \vec{U}_i = v_{x,i}^* \Delta t \vec{U}_i \quad \text{when } v_{x,i}^* > 0 \quad (19)$$

$$v_{x,i}^* \Delta t \vec{U}_{i+1} \quad \text{when } v_{x,i}^* < 0 \quad (20)$$

これを用いて元の Euler セルの保存量を計算する。

Remap された保存量を元の変数  $\rho$ ,  $v_{x,y,z}$ ,  $p$ ,  $B_{x,y,z}$  に戻すと 1cycle の発展が終了する。

### 0.3 座標と変数の定義

座標と変数は図2の位置で定義する。

セル中心で定義される変数:  $U(i,1); \rho$ ,  $U(i,2); v_x$ ,  $U(i,3); v_y$ ,  $U(i,4); v_z$ ,  $U(i,5); p$ ,  $U(i,6); B_x$ ,  $U(i,7); B_y$ ,  $U(i,8); B_z$

セル表面で定義される変数:  $Va(i)$ ,  $Pa(i)$  (Riemann問題を解いて求めた接触不連続面の速度と圧力)

座標はセル中心の右が  $x(i)$ , 左が  $x(i-1)$  と定義される。1次元問題の場合、 $\nabla \cdot \vec{B} = 0$  から  $B_x$  は一様定数なので  $U(i,6)$  を変数として確保する必要は無いが、3Dコードの名残として残っている。

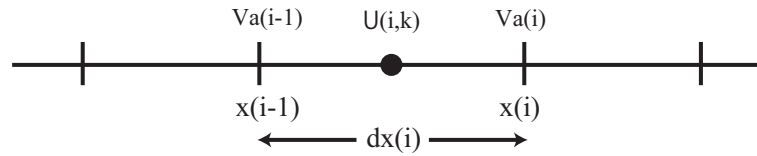


Figure 2: 変数の定義位置.

### 0.4 サブルーチン

以下は理想磁気流体方程式の時間発展部分に使われるサブルーチン

INITIA: 初期条件の生成

EVOLVE: 時間発展

SAVEU: 書き出し保存

BC: 境界条件の設定

MHD: 流体パートの1次元時間発展 (RHS, MOC, REMAP を呼び出す)

RHS: リーマン問題を解いてラグランジュ的に時間発展

RIEMAN: リーマン問題を解いて接触不連続面の圧力と速度を計算

REMAP: ラグランジュ的に時間発展させた変数をオイラー座標に戻す

VLIMIT: 変数の勾配を計算

COURAN: クーラン条件を計算

MOC: 特性曲線法で磁気張力、誘導起電力を計算

### 0.5 インプットファイル

サブルーチン: INITIA では INPUT.DAT を読み込んで計算の初期条件とコントロールパラメータを設定する。INPUT.DAT に設定すべきパラメータとその意味は以下の通り。

Np1x, Np2x: 計算に用いる mesh 数を決めるパラメータ。Np1x+Np2x が全 mesh 数になる (2つに分けてあるのは初期条件をして shock tube 問題を想定しているから)。

ql1x, ql2x: 計算領域の長さ (ql1x+ql2x が計算領域のサイズになる)。

dinit1:  $0 < x < ql1x$  の初期密度、dinit2:  $ql1x < x < ql1x + ql2x$  の初期密度

vinitx1, vinitx2: 初期速度の  $x$  成分、vinity1, vinity2: 初期速度の  $y$  成分、vinitz1, vinitz2: 初期速度の  $z$  成分

pinit1, pinit2: 初期圧力

Binitx1, Binitx2: 初期磁場の  $x$  成分、Binity1, Binity2: 初期磁場の  $y$  成分、Binitz1, Binitz2: 初期磁場の  $z$  成分

Hini1, Hini2: H の初期数密度、pini1, pini2: p の初期数密度、H2ini1, H2ini2:  $H_2$  の初期数密度

Heini1, Heini2: He の初期数密度、Hepini1, Hepini2:  $He^+$  の初期数密度、Cini1, Cini2: C の初期数密度

Cpini1, Cpini2:  $C^+$  の初期数密度、COini1, COini2: CO の初期数密度

CFL: CFL 数。通常は 0-0.5 の範囲内だが、Godunov 法は非常に安定なので 0.499 を指定しておけば問題ない。

facdep: 1.0 だと 2 次精度、0.0 だと 1 次精度の計算になる。

maxstep: 計算が終了する迄に変数を保存する回数

nitera: 変数を保存する迄に時間発展させるステップ数 (nitera step に 1 度変数を保存する)

tfinal: 計算の終了時刻

BCx1: 左端の境界条件 (1 だと自由境界、3 だと周期境界を設定する)、BCx2: 右端の境界条件

iflag: 0 なら Euler 座標で計算、2 なら Lagrange 座標で計算

ifchem: 2 なら化学反応を解き、0 なら解かない。

ifthrm: 2 なら熱伝導と加熱/冷却を解き、0 なら解かない。

ifrad: 2 なら化学反応率や加熱/冷却率に光学的厚みを考慮し、0 なら考慮しない。

## 0.6 無次元化

コード中では変数を以下のように無次元化 ( $\sim$  付き変数) している。

$$\tilde{x} = x/l_0, \tilde{t} = t/t_0, \tilde{\rho} = \rho/\rho_0, \tilde{v} = \frac{v t_0}{l_0}, \tilde{p} = \frac{p t_0^2}{\rho_0 l_0^2}, \tilde{B} = B \sqrt{\frac{t_0^2}{\rho_0 l_0^2}}, \quad (21)$$

where,  $l_0 = 1$  pc,  $t_0 = 1$  Myr,  $\rho_0 = m_p$ . こうすると、 $\tilde{x} = 1$  は 1 pc,  $\tilde{t} = 1$  は 1 Myr,  $\tilde{\rho} = 1$  は  $1 \text{ cm}^{-3}$  当りの核子量になる。基礎方程式中の  $B$  は最初から  $\sqrt{4\pi}$  で規格化してあるので、有次元量に戻すときは、 $B = \tilde{B} \sqrt{4\pi \rho_0 l_0^2/t_0^2}$  としなければならないことに注意。また、無次元化された Boltzman 定数を  $\tilde{k}_B = 8.63359 \times 10^{-3}$  に選ぶ。すると  $\tilde{T} = 1$  は  $T = 10^3$  K に対応する。

## 0.7 Microphysics

考慮されている化学種：p, H, H<sub>2</sub>, He, He<sup>+</sup>, C, C<sup>+</sup>, CO

流体の密度： $\rho = m_H n_H + m_H n_p + 2 m_H n_{H_2} + m_{He} n_{He} + m_{H_2} n_{He+}$

全原子数密度 (ダスト量の算出に使用)： $n_{tot} = n_p + n_H + 2 n_{H_2} + n_{He} + n_{He+}$

電子数密度： $n_e = n_p + n_{He+} + n_{C+}$

各化学種の数密度の進化はオペレーター分離法を用いて、反応毎に Inoue & Inutsuka (2008) で開発された区分厳密解法で進化させる (サブルーチン: Source)。この方法は無条件安定で且つコーディングが非常に簡単にできる。導入されている化学反応は次節参照。新たな化学反応を導入する場合も、他の解法とは異なり既存のコードに新しい反応の分離された解を足すだけ済み、拡張性が極めて高い。

例えば水素のイオン化と再結合のオペレーターを分離すると

$$\frac{dn_H}{dt} = -\zeta n_H + k_{Hrec} n_e n_p, \quad (22)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = \zeta n_H - k_{Hrec} n_e n_p, \quad (23)$$

であり、この常微分方程式は以下の厳密解を持つ

$$n_H(t + \Delta t) = \frac{k_{Hrec} n_e n_H(t) + \zeta n_H(t) \exp[-t(\zeta + k_{Hrec} n_e)] + k_{Hrec} n_e n_p(t) \{1 - \exp[-t(\zeta + k_{Hrec} n_e)]\}}{\zeta + k_{Hrec} n_e} \quad (24)$$

$$n_p(t + \Delta t) = \frac{\zeta n_p(t) + k_{Hrec} n_e n_p(t) \exp[-t(\zeta + k_{Hrec} n_e)] + \zeta n_H(t) \{1 - \exp[-t(\zeta + k_{Hrec} n_e)]\}}{\zeta + k_{Hrec} n_e}, \quad (25)$$

ここで、本来  $n_e$  は  $n_p$  の関数であるが、1 時間ステップでは変化は小さいので時刻  $t$  での値で固定されていると近似した。他の反応についても順次同様に発展させる。分離の数が少ない程精度は良くなるので、厳密解を持ち得る最大公約数的な分離を行うと良い。

オペレーター分離を行っている為、時間精度は厳密には 1 次であるが、冷却で決まる時間ステップは化学反応の時間スケールよりも十分小さくなるので精度は十分良い。それでもより精度を求めたいならルンゲクッタ法等で解いても良いが、安定性に常に注意する必要がある。一方で区分厳密解法は無条件安定である。安定性を保証する為に化学反応を陰解法で解くことが良く行われているが、安定性の高い陰解法は時間一次精度であり区分厳密解法と比べて精度が優れている訳ではない。さらに陰解法の場合、化学種が多くなると大きな行列の複数回の反転が必要になり、コードの拡張性が低く計算コストも高くなってしまう。総合すると区分厳密解法を用いることが精度、安定性、拡張性の面で薦められる。

### 0.7.1 Chemistry

H+CR→p+e:

$$\frac{dn_H}{dt} = -\zeta n_H, \quad (26)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = \zeta n_H, \quad (27)$$

where,  $\zeta = 3 \times 10^{17} \text{ s}^{-1}$  ( $\tilde{\zeta} = 9.467 \times 10^{-4}$ ).

He+CR→He<sup>+</sup>+e:

$$\frac{dn_{He}}{dt} = -\zeta_{He} n_{He}, \quad (28)$$

$$\frac{dn_{He+}}{dt} = \zeta_{He} n_{He}. \quad (29)$$

where,  $\zeta_{\text{He}} = 1.087 \zeta$  (Millar et al. 1997).

$\text{C} + \text{CR} \rightarrow \text{C}^+ + \text{e}$ :

$$\frac{dn_C}{dt} = -\zeta_C n_C, \quad (30)$$

$$\frac{dn_{C^+}}{dt} = \zeta_C n_C, \quad (31)$$

where,  $\zeta_C = 3.846 \zeta$  (Millar et al. 1997).

$\text{H} + \text{H} \rightarrow \text{p} + \text{H} + \text{e}$ :

$$\frac{dn_H}{dt} = -k_{\text{HiH}} n_H n_H \quad (32)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = k_{\text{HiH}} n_H n_H, \quad (33)$$

where,  $k_{\text{HiH}} = 3. \text{e} - 13 (T/300\text{K})^{0.5} \exp(-1.49\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{H} + \text{e} \rightarrow \text{p} + 2 \text{e}$ :

$$\frac{dn_H}{dt} = -k_{\text{Hie}} n_H n_e \quad (34)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = k_{\text{Hie}} n_H n_e, \quad (35)$$

where,  $k_{\text{Hie}} = 1. \text{e} - 9 (T/300\text{K})^{0.5} \exp(-1.58\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{He} + \text{H}$  (or  $\text{H}_2$  or  $\text{p}$ )  $\rightarrow \text{He}^+ + \text{H}$  (or  $\text{H}_2$  or  $\text{p}$ ) +  $\text{e}$ :

$$\frac{dn_{\text{He}}}{dt} = -k_{\text{HeiH}} n_{\text{He}} (n_H + n_{\text{H}_2} + n_p) \quad (36)$$

$$\frac{dn_{\text{He}^+}}{dt} = k_{\text{HeiH}} n_{\text{He}} (n_H + n_{\text{H}_2} + n_p), \quad (37)$$

where,  $k_{\text{HeiH}} = 8.63 \text{e} - 14 (T/300\text{K})^{0.43} \exp(-2.85\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{He} + \text{e} \rightarrow \text{He}^+ + 2 \text{e}$ :

$$\frac{dn_{\text{He}}}{dt} = -k_{\text{Heie}} n_{\text{He}} n_e \quad (38)$$

$$\frac{dn_{\text{He}^+}}{dt} = k_{\text{Heie}} n_{\text{He}} n_e, \quad (39)$$

where,  $k_{\text{Heie}} = 5.1 \text{e} - 10 (T/300\text{K})^{0.43} \exp(-2.85\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{C} + \text{H}$  (or  $\text{H}_2$  or  $\text{p}$ )  $\rightarrow \text{C}^+ + \text{H}$  (or  $\text{H}_2$  or  $\text{p}$ ) +  $\text{e}$ :

$$\frac{dn_C}{dt} = -k_{\text{CiH}} n_C (n_H + n_{\text{H}_2} + n_p) \quad (40)$$

$$\frac{dn_{C^+}}{dt} = k_{\text{CiH}} n_C (n_H + n_{\text{H}_2} + n_p), \quad (41)$$

where,  $k_{\text{CiH}} = 5.9 \text{e} - 13 (T/300\text{K})^{0.4} \exp(-1.31\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{C} + \text{e} \rightarrow \text{C}^+ + 2 \text{e}$ :

$$\frac{dn_C}{dt} = -k_{\text{Cie}} n_C n_e \quad (42)$$

$$\frac{dn_{C^+}}{dt} = k_{\text{Cie}} n_C n_e, \quad (43)$$

where,  $k_{\text{Cie}} = 3.4 \text{e} - 9 (T/300\text{K})^{0.4} \exp(-1.31\text{e}5/T)$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

p+e→H:

$$\frac{dn_H}{dt} = k_{\text{Hrec}} n_e n_p \quad (44)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = -k_{\text{Hrec}} n_e n_p, \quad (45)$$

where,  $k_{\text{Hrec}}$  is taken from Shapiro & Kang (1987).

He<sup>+</sup>+e→He:

$$\frac{dn_{He}}{dt} = k_{\text{Herec}} n_e n_{He^+} \quad (46)$$

$$\frac{dn_{He^+}}{dt} = -k_{\text{Herec}} n_e n_{He^+}, \quad (47)$$

where,  $k_{\text{Hrec}}$  is taken from Shapiro & Kang (1987).

C<sup>+</sup>+e→C:

$$\frac{dn_C}{dt} = k_{\text{Crec}} n_e n_{C^+} \quad (48)$$

$$\frac{dn_{C^+}}{dt} = -k_{\text{Crec}} n_e n_{C^+}, \quad (49)$$

where,  $k_{\text{Crec}}$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

H+H+grain→H<sub>2</sub>+grain:

$$\frac{dn_{H2}}{dt} = k_{\text{H2}} n_{\text{tot}} n_H \quad (50)$$

$$\frac{dn_H}{dt} = -2 k_{\text{H2}} n_{\text{tot}} n_H, \quad (51)$$

where,  $k_{\text{H2}}$  is taken from Tilelens & Hollenbach (1985).

H<sub>2</sub>+γ→2H:

$$\frac{dn_{H2}}{dt} = -k_{\text{H2ph}} n_{H2} \quad (52)$$

$$\frac{dn_H}{dt} = 2 k_{\text{H2ph}} n_{H2}, \quad (53)$$

where,  $k_{\text{H2ph}}$  is taken from Glover & MacLow 2007; Draine & Bertoldi (1996).

H<sub>2</sub>+H→3H:

$$\frac{dn_{H2}}{dt} = -k_{\text{H2dH}} n_{H2} n_H \quad (54)$$

$$\frac{dn_H}{dt} = 2 k_{\text{H2dH}} n_{H2} n_H, \quad (55)$$

where,  $k_{\text{H2dH}}$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

H<sub>2</sub>+e→2H:

$$\frac{dn_{H2}}{dt} = -k_{\text{H2de}} n_{H2} n_e \quad (56)$$

$$\frac{dn_H}{dt} = 2 k_{\text{H2de}} n_{H2} n_e, \quad (57)$$

where,  $k_{\text{H2de}}$  is taken from Hollenbach & McKee (1989).

$\text{H}_2 + \text{He}^+ \rightarrow \text{p} + \text{H} + \text{He}$ :

$$\frac{dn_{\text{H}_2}}{dt} = -k_{\text{H2dHep}} n_{\text{H}_2} n_{\text{He}^+} \quad (58)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = k_{\text{H2dHep}} n_{\text{H}_2} n_{\text{He}^+} \quad (59)$$

$$\frac{dn_{\text{H}}}{dt} = k_{\text{H2dHep}} n_{\text{H}_2} n_{\text{He}^+} \quad (60)$$

$$\frac{dn_{\text{He}^+}}{dt} = -k_{\text{H2dHep}} n_{\text{H}_2} n_{\text{He}^+} \quad (61)$$

$$\frac{dn_{\text{He}}}{dt} = k_{\text{H2dHep}} n_{\text{H}_2} n_{\text{He}^+}, \quad (62)$$

where,  $k_{\text{H2dHep}} = 3.7 \times 10^{-14} \exp(-35/T) \text{ sec}$  (Millar et al. 1997).

$\text{C}^+ \rightarrow \text{CO}$ :

$$\frac{dn_{\text{CO}}}{dt} = k_{\text{CO}} n_{\text{C}^+} \quad (63)$$

$$\frac{dn_{\text{C}}}{dt} = -k_{\text{CO}} n_{\text{C}^+}, \quad (64)$$

where,  $k_{\text{COph}}$  is taken from Nelson & Langer (1997).

$\text{CO} + \gamma \rightarrow \text{C} + \text{O}$ :

$$\frac{dn_{\text{CO}}}{dt} = -k_{\text{COph}} n_{\text{CO}} n_{\text{H}_2} \quad (65)$$

$$\frac{dn_{\text{C}}}{dt} = k_{\text{COph}} n_{\text{CO}} n_{\text{H}_2}, \quad (66)$$

where,  $k_{\text{COph}}$  is taken from Nelson & Langer (1997).

$\text{CO} + \text{He}^+ \rightarrow \text{C}^+ + \text{O} + \text{He}$ :

$$\frac{dn_{\text{CO}}}{dt} = -k_{\text{COdHep}} n_{\text{CO}} n_{\text{He}^+} \quad (67)$$

$$\frac{dn_{\text{C}^+}}{dt} = k_{\text{COdHep}} n_{\text{CO}} n_{\text{He}^+} \quad (68)$$

$$\frac{dn_{\text{He}^+}}{dt} = -k_{\text{COdHep}} n_{\text{CO}} n_{\text{He}^+} \quad (69)$$

$$\frac{dn_{\text{He}}}{dt} = k_{\text{COdHep}} n_{\text{CO}} n_{\text{He}^+}, \quad (70)$$

where,  $k_{\text{COdHep}} = 1.6 \times 10^{-9} \text{ sec}$  (Millar et al. 1997).

$\text{C} + \gamma \rightarrow \text{C}^+ + \text{e}$ :

$$\frac{dn_{\text{C}}}{dt} = -k_{\text{Cph}} n_{\text{C}} \quad (71)$$

$$\frac{dn_{\text{C}^+}}{dt} = k_{\text{Cph}} n_{\text{C}}, \quad (72)$$

where,  $k_{\text{Cph}}$  is taken from Tilelens & Hollenbach (1985).

## 0.7.2 Cooling & Heating

加熱冷却反応は時間2次精度の陽解法で解く (サブルーチン: Source)。各時間発展ステップの最初にサブルーチン: stblty で算出された時間刻みが流体部分の進化の結果満たせなくなる場合には、そのセルだけを陰解法で解いて安定性を確保している (サブルーチン: IMC)。

Ly- $\alpha$  cooling (Spitzer 1978):

$$\Lambda = 7.3 \times 10^{-19} n_e n_{\text{H}} \exp(-1.184 \times 10^5/T) \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-3} \quad (73)$$



C<sup>+</sup> finestructure cooling: 2 準位系の放射率は

$$\Lambda = A_{21} E_{21} \beta(\tau) n_2, \quad (74)$$

$$n_2 = \frac{C_{12} n_{C^+}}{C_{12} + C_{21} + A_{21} \beta(\tau)} \quad (75)$$

$$C_{21} = \gamma_e n_e + \gamma_H n_H \quad (76)$$

$$C_{12} = 2 C_{21} \exp\left(\frac{-E_{21}}{T k_b}\right) \quad (77)$$

where,  $A_{21} = 2.4 \times 10^{-6}$ ,  $E_{21} = 92 k_b$ ,  $\gamma_H = 8.0 \times 10^{-10} (T/100 \text{ K})^{0.07}$ ,  $\gamma_e = 2.8 \times 10^{-7} (T/100 \text{ K})^{0.5}$ , and the escape provability formula  $\beta(\tau)$  is taken from de Jong et al. (1980):

$$\beta(\tau) = \frac{1 - \exp(-2.34 \tau)}{4.68 \tau} \text{ for } \tau < 7 \quad (78)$$

$$= \frac{1}{4 \tau \{\ln(\tau/\sqrt{\pi})\}^{1/2}} \text{ for } \tau > 7 \quad (79)$$

$$\tau = \frac{A_{21} \lambda^3}{8 \pi \delta v} \int \frac{C_{21} (1 - \exp(-E_{21}/k_b T)) + A_{21} \beta}{C_{21} (1 + \exp(-E_{21}/k_b T)) + A_{21} \beta} dx \quad (80)$$

$$\lambda = 1.577 \times 10^{-2} \quad (81)$$

ここで、(80) 式中の  $\beta(\tau)$  は前の時刻の  $\tau$  を用いて近似評価する。

この冷却は光学的に薄い部分で効果的なので、以下の簡単な冷却関数 (Wolfire et al. 2003) を用いて計算を簡略化しても良い。

$$\Lambda = \{3.15 \times 10^{-27} (n_H + 0.5 n_{H_2}) + 1.4 \times 10^{-24} (T/100 \text{ K})^{-0.5} n_e\} n_{tot} \beta(\tau) \exp(-92/T) \quad (82)$$

$$\tau = N_{C^+, \tau=1}^{-1} \int n_{C^+} dx \quad (83)$$

were,  $N_{C^+, \tau=1} = 1.495 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (Hollenbach & McKee 1989) and the escape provability formula is taken from de Jong et al. (1980).

O finestructure cooling: 3 準位系として扱っても良いが、主要な冷却剤ではないので Wolfire et al. (2003) の冷却関数を用いる。

$$\Lambda = 2.5 \times 10^{-27} (T/100 \text{ K})^{0.4} (n_H + 0.5 n_{H_2}) n_{tot} \beta(\tau) \exp(-228/T) \quad (84)$$

$$\tau = N_{O, \tau=1}^{-1} \int n_O dx \quad (85)$$

were,  $N_{O, \tau=1} = 2.646 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$  (Hollenbach & McKee 1989) and the escape provability formula is taken from de Jong et al. (1980).

バグ: tO1 = 3.40057d-6\*Ntot(i,1)/xo ; tO2 = 3.40057d-6\*Ntot(i,2)/xo ではなく  
tO1 = 11.6618d0\*Ntot(i,1)\*xo ; tO2 = 11.6618d0\*Ntot(i,2)\*xo が正解。

CO ro-vibrational cooling (McKee et al. 1982, Hosokawa & Inutsuka 2006):

$$\Lambda = f_{esc} n_{CO} \frac{4 (k_b T)^2 9.7 \times 10^{-8}}{2.76 k_b}, \quad (86)$$

$$n_{cr} = 3.3 \times 10^6 (T/1000 \text{ K})^{3/4} \quad (87)$$

$$f_{esc} = \frac{2 + y(\tau) + 0.6 y(\tau)^2}{1 + c(\tau) + n_{cr}/n + 1.5 \sqrt{n_{cr}/n}} \quad (88)$$

$$y(\tau) = \ln\left(1 + \frac{c(\tau)}{1 + 10 n_{cr}/n}\right) \quad (89)$$

$$c(\tau) = \tau \sqrt{2 \pi \ln(2.13 + (\tau/e)^2)} \quad (90)$$

$$\tau = \frac{4.3165 \times 10^{-15} N_{CO}}{T dv} \quad (91)$$

Cooling due to recombination of grains (Bakes & Tielens 1994, Glover & MacLow 2007):

$$\Lambda = 4.65 \times 10^{-30} n_e n T^{0.94} \Phi \quad (92)$$

$$\Phi = \frac{G_0 \exp(-2.5 Av) \sqrt{T}}{n_e} \quad (93)$$

where  $G_0 = 1$  corresponds Habing flux.

Photoelectric heating by PAH (Bakes & Tielens 1994, Glover & MacLow 2007):

$$\Gamma = 1.3 \times 10^{-24} G_0 \exp(-2.5 Av) n \left( \frac{0.049}{1 + 4.0 \times 10^{-3} \Phi^{0.73}} + \frac{0.037}{1 + 2.0 \times 10^{-4} \Phi} \right) \quad (94)$$

Cosmicray Heating(Glover & MacLow 2007):

$$\Gamma = 3.2 \times 10^{-28} \left( \frac{\zeta}{10^{-17} \text{ s}^{-1}} \right) n \quad (95)$$

H<sub>2</sub> photo-dissociation heating (Black & Dalgarno 1997, Glover & MacLow 2007):

$$\Gamma = 6.4 \times 10^{-13} k_{H2ph} n_{H_2} \quad (96)$$

## 0.8 オペレーター分離法

以下のような偏微分方程式を考える。

$$\partial_t f = A[f] + B[f] \quad (97)$$

ここで、 $A, B, C$  は  $f$  に作用する任意の演算子であり、空間微分等でも良い。時刻  $t$  から  $dt$  後の  $f$  は時間 2 次精度まで

$$f(t+dt) = f(t) + dt \partial_t f(t) + \frac{dt^2}{2} \partial_t^2 f(t) + O(dt^3) \quad (98)$$

$$= f(t) + dt \{A[f(t)] + B[f(t)]\} + \frac{dt^2}{2} \{\partial_t (A[f(t)] + B[f(t)])\} + O(dt^3) \quad (99)$$

$$= f(t) + dt \{A[f(t)] + B[f(t)]\} + \frac{dt^2}{2} \{(A[f(t)] + B[f(t)]) \partial_f (A[f(t)] + B[f(t)])\} + O(dt^3) \quad (100)$$

と書ける。以下では明示しなければ  $f$  は時刻  $t$  で評価された  $f(t)$  であるものとする。

次に、まず演算子  $A$  にみについて 2 次精度で発展させたすると

$$\tilde{f} = f + dt A[f] + \frac{dt^2}{2} \partial_t A[f] + O(dt^3) \quad (101)$$

$$= f + dt A[f] + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f A[f] + O(dt^3) \quad (102)$$

と評価される。 $A$  のみについて発展させた  $\tilde{f}$  を初期値として、次に演算子  $B$  のみについて 2 次精度で発展させると

$$f(t+dt) = \tilde{f} + dt B[\tilde{f}] + \frac{dt^2}{2} \partial_t B[\tilde{f}] + O(dt^3) \quad (103)$$

$$= f + dt A[f] + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f A[f] + dt B[f + dt A[f]] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] + O(dt^3) \quad (104)$$

$$= f + dt (A[f] + B[f]) + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f A[f] + dt^2 A[f] \partial_f B[f] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] + O(dt^3) \quad (105)$$

となる。この結果は方程式の真の 2 次精度の解である (100) 式と  $O(dt^2)$  異なっている。つまり、オペレーター分離法を用いると、それぞれのオペレーターについて 2 次精度の解法を用いても、総合された解は時間については 1 次精度になってしまう。逆に  $dt$  が小さければオペレーター分離法を用いても  $O(dt^2)$  の誤差しか生じないとも言える。本計算コードではほとんどの状況下で  $dt$  は冷却の時間スケールで決まり非常に小さいので後者の立場となりオペレーター分離法が正当化される。

$O(dt^2)$  の誤差が深刻な場合は、以下のように一手間かけるとオペレーター分離法を用いても2次精度の解を得ることが出来る (誤差を  $O(dt^3)$  にできる)。まず演算子  $A$  にみについて2次精度で  $dt/2$  発展させ、

$$\tilde{f} = f + \frac{dt}{2} A[f] + \frac{dt^2}{8} \partial_t A[f] + O(dt^3) \quad (106)$$

$$= f + \frac{dt}{2} A[f] + \frac{dt^2}{8} A[f] \partial_f A[f] + O(dt^3) \quad (107)$$

次に  $\tilde{f}$  を初期値として演算子  $B$  について  $dt$  発展させる

$$\hat{f} = \tilde{f} + dt B[\tilde{f}] + \frac{dt^2}{2} \partial_t B[\tilde{f}] + O(dt^3) \quad (108)$$

$$= f + \frac{dt}{2} A[f] + \frac{dt^2}{8} A[f] \partial_f A[f] + dt B[f + \frac{dt}{2} A[f]] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] + O(dt^3) \quad (109)$$

$$= f + dt (A[f]/2 + B[f]) + \frac{dt^2}{8} A[f] \partial_f A[f] + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f B[f] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] + O(dt^3) \quad (110)$$

最後に  $\hat{f}$  を初期値として演算子  $A$  について再度  $dt/2$  発展させると

$$f(t+dt) = \hat{f} + \frac{dt}{2} A[\hat{f}] + \frac{dt^2}{8} \partial_t A[\hat{f}] + O(dt^3) \quad (111)$$

$$= f + dt (A[f]/2 + B[f]) + \frac{dt^2}{8} A[f] \partial_f A[f] + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f B[f] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] \quad (112)$$

$$+ \frac{dt}{2} A[f + dt (A[f]/2 + B[f])] + \frac{dt^2}{8} A[f] \partial_f A[f] + O(dt^3) \quad (113)$$

$$= f + dt (A[f] + B[f]) + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f A[f] + \frac{dt^2}{2} A[f] \partial_f B[f] + \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f B[f] \quad (114)$$

$$+ \frac{dt^2}{2} B[f] \partial_f A[f] + O(dt^3) \quad (115)$$

となり、これは (100) 式に一致する。オペレーターが3つ以上の場合でも  $A$  について  $dt/2$ 、 $B$  について  $dt/2$ 、 $C$  について  $dt$ 、 $B$  について  $dt/2$ 、 $A$  について  $dt/2$  というように対称な順番で発展させると2次精度になる。明らかに最も計算コストのかかる演算子をオペレーター  $C$  に選ぶべきである。本計算コードの場合ならば、オペレーター  $C$  は MHD solver, オペレーター  $A, B$  は化学反応と冷却&熱伝導になる。