

準平衡によるシリコン燃焼反応

甲南大学 理論研究室 柴田まさき

概要

鉄やその周辺の原子核は大質量星のコア崩壊直前や超新星爆発の間、または熱核反応型超新星で作られる。質量数が 28~64 という多様な原子核を作るのは完全、不完全シリコン燃焼である。シリコン燃焼では多くの元素が関係するために、正確なモデル構築には大きな計算コストがかかる。しかし、これまでのケイ素燃焼の研究によって、その元素組成進化は相互平衡にある元素によって支配されているという事が明らかにされた。そこで私たちは新しい混合平衡ネットワークスキームを発表する。このスキームはシリコン燃焼の準平衡状態を活用し独立変数の数を減らしている。これによって元素の質量比や非レプトン化、またエネルギー生成の正確な予測にかかる計算コストを、従来の原子核反応ネットワークに比べて大いに減少させる事ができる。シリコン燃焼の間、この準平衡ネットワークは、1/3 以下の元素質量比の追跡で、精度を失う事なく、従来の完全なネットワークよりも 1 桁程度速い計算を実現する。この計算コスト、必要な元素種の削減が可能な準平衡ネットワークは特に、多次元の流体計算に適している。

1 Introduction

シリコンから鉄、ニッケル、その周辺元素への変化は大質量星のコアにおける最後のエネルギー生成であり、これらの元素は総称して鉄族元素と呼ばれる。シリコン燃焼コアは中心に閉じ込められているが、超新星爆発の際に起こる熱核反応、あるいは超新鋭爆発の衝撃によって鉄族元素が出来上がる。このシリコン燃焼における元素存在比の進化はNSE(核統計平衡)によって記述される。

Hix&Woosley らはシリコン燃焼モデルの初期の段階で、二つの QSE (準統計平衡) グループが成立する事を発見した。一つはシリコンからスカンジウムで、もう一つはチタンから鉄にかけての集団である。Thielemann (1999) はこの QSE グループが、シリコン燃焼や爆発的シリコン燃焼における多種の元素存在比の見積もりを可能にする事を示した。

この燃焼過程は A=28~64 という多様な元素が関係している。また、電子捕獲によって中性子が進み、たくさんの同位元素の追跡が必要となる。それによって、物理的に短いイベントであるにもかかわらず、他の燃焼過程よりも計算コストがかかってしまうのである。

本稿では QSE を用いて、本来の核反応ネットワークよりも計算コストを削減しつつ、各元素のアバダンスやエネルギー生成率を正確に見積もる。

2 一般的な元素合成の計算

ここでは、元素合成による各種分布の時間変化を表す rate equation を考える。星の内部元素の数密

度は星の膨張や収縮によって刻々と変化してしまう量で、各種の分布を表すのに適切ではない。そこで、質量密度を $\rho = \sum_i N_i A_i / N_A = (\sum_i N_i A_i) M_u$ と定義する (N_i は数密度、 N_A はアボガドロ数、 M_u は原子単位質量)。この新しく定義した質量密度は核子数の保存より変化しない量である。これを用いて、ある元素 i の mass fraction X_i は $X_i \equiv N_i A_i / \rho N_A = N_i A_i / \sum_i N_i A_i$ 、アバダンス Y_i は $Y_i \equiv X_i / A_i = N_i / \sum_i N_i A_i$ と定義される。ある元素 i の数密度の時間変化の時間変化を考えると

$$\dot{N}_i = \sum_j \mathcal{N}_j^i \lambda_j N_j + \sum_{j,k} \mathcal{N}_{j,k}^i N_j N_k \langle j, k \rangle + \sum_{j,k,l} \mathcal{N}_{j,k,l}^i N_j N_k N_l \langle j, k, l \rangle, \quad (1)$$

と表現できる。ここで $N_i = Y_i \rho N_A$ を (1) に代入すると

$$\dot{Y}_i = \sum_j \mathcal{N}_j^i \lambda_j Y_j + \sum_{j,k} \mathcal{N}_{j,k}^i Y_j Y_k \rho N_A \langle j, k \rangle + \sum_{j,k,l} \mathcal{N}_{j,k,l}^i \rho^2 N_A^2 \langle j, k, l \rangle Y_j Y_k Y_l, \quad (2)$$

が得られる。これを Y_i に関する rate equation と言う。ここで λ_j は崩壊確率 (1/sec.)、 $\langle j, k \rangle$ は二体の核反応率、 $\langle j, k, l \rangle$ は三体の核反応率である。また \mathcal{N} については核種が生成される項は +、消滅の項は - の符号を持つ factor で、且つ同粒子の衝突の数え過ぎを防ぐ factor も含む。右辺の項はそれぞれ、1 体反応 (β, γ 崩壊など)、2 体反応、3 体反応 (トリプル α 反応など) を表す。rate equation を

すべての元素について書きくだし、連立したものを解く事でアバダンスの時間発展を求める事ができる。

この rate equation を解くには implicit method が用いられる。差分化したものを time step $n+1$ の関数として表現し、そうして得られた関数を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}(t + \Delta t) &\equiv \frac{Y(t + \Delta t) - Y(t)}{\Delta t} - \dot{Y}(t + \Delta t) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

これを Y について 1 次までテーラー展開すると

$$\Delta Y = \left[\frac{\partial \mathcal{Z}(t + \Delta t)}{\partial Y(t + \Delta t)} \right]^{-1} \mathcal{Z}, \quad (4)$$

が得られる。 $\partial \mathcal{Z} / \partial Y$ は \mathcal{Z} のヤコビアンである。一般的にはこれを解くことで、元素のアバダンスの時間発展を追う。

3 QSE NETWORK

QSE グループの存在は多種の元素のアバダンスの計算を可能にする。例えば ^{28}Si の場合、Si グループ ($^{28}\text{Si} \sim ^{44}\text{Ti}$) における アバダンスは

$$Y_{\text{QSE,Si}}(A Z) = \frac{C(A Z)}{C(^{28}\text{Si})} Y(^{28}\text{Si}) Y_p^{Z-14} Y_n^{N-14}, \quad (5)$$

と書く事ができる。ここで新たに、 Y^F を FULL NUCLEAR NETWORK から計算されるアバダンスと定義する。 Y^F は QSE 状態下では REDUCED NUCLEAR SET $Y^R = [Y_{n,p,^{28}\text{Si},^{56}\text{Ni}}]$ で表現する事ができる。アバダンスの時間微分を簡単に計算する為に、以下に 4 つの QSE グループアバダンスを定義する。

$$\begin{aligned} Y_{\text{NG}} &= \sum_{i \in \text{Lt group}} N_i Y_i + \sum_{i \in \text{Si group}} (N_i - 14) Y_i \\ &\quad + \sum_{i \in \text{Fe group}} (N_i - 28) Y_i, \\ Y_{\text{ZG}} &= \sum_{i \in \text{Lt group}} Z_i Y_i + \sum_{i \in \text{Si group}} (Z_i - 14) Y_i \\ &\quad + \sum_{i \in \text{Fe group}} (Z_i - 28) Y_i, \\ Y_{\text{SiG}} &= \sum_{i \in \text{Si group}} Y_i, \\ Y_{\text{FeG}} &= \sum_{i \in \text{Fe group}} Y_i, \end{aligned} \quad (6)$$

ここで、 Y_{SiG} 、 Y_{FeG} はシリコン、鉄グループのトータルのアバダンスであり、 Y_{NG} はそれぞれのグ

ループにおける ^{28}Si 、 ^{56}Fe の中性子数 14、28 を基準にした中性子過剰度、 Y_{ZG} は陽子過剰度を表している。これらをグループアバダンスとして定義している。これによって追跡必要のある反応の数を減らす事ができる。例えば、 ^{56}Fe の中性子捕獲反応をみてる。鉄グループの足し合わせは $[(31 - 28) - (30 - 28) = 1] \rho N_A < j, k > Y_n Y(^{56}\text{Fe})$ となる。一方、軽粒子に関する足し合わせは $[-1] \rho N_A < j, k > Y_n Y(^{56}\text{Fe})$ となって、前者と打ち消しあう。これによって計算を大幅に削減できる。

しかし、 dY^G/dt は未だに Y^F の関数であるので計算が難しい。ここで Y^Q ((4) のような、QSE によって計算されるアバダンス) を Y^G (NG,ZG,SiG,FeG) に代入してやる。そうする事により、 dY^G/dt を Y^R の関数で書く事ができて、計算が容易になる。アバダンスの微小変化にはヤコビアンの上行列が必要な事は 2 章で示した。ここでヤコビアンは以下のように書き換えられる。

$$\frac{\partial \mathcal{Z}_i^G}{\partial Y_j^G} = \frac{\delta_{ij}}{\Delta t} - \frac{\partial \dot{Y}_i^G}{\partial Y_j^G}. \quad (7)$$

右辺の第二項目は以下のように書き換える事ができる。

$$\frac{\partial \dot{Y}_i^G}{\partial Y_j^G} = \frac{\partial \dot{Y}_i^G}{\partial Y^R} \frac{\partial Y^R}{\partial Y_j^G}. \quad (8)$$

右辺の第一項に関しては、 \dot{Y}^G は Y^R の関数なので、比較的簡単に計算できる。複雑なのは右側の方で、 $\partial Y_{n,p,\text{Si,Fe}} / \partial Y_{\text{NG,ZG,SiG,FeG}}$ を計算する事となる。最初の方程式 $\partial Y_n / \partial Y_{\text{NG}}$ を計算すると、以下のようになる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_{\text{NG}}}{\partial Y_{\text{NG}}} = 1 &= \sum_{i \in \text{Lt group}} N_i \left(\frac{N_i Y_i}{Y_n} \frac{\partial Y_n}{\partial Y_{\text{NG}}} + \frac{Z_i Y_i}{Y_p} \frac{\partial Y_p}{\partial Y_{\text{NG}}} \right) \\ &\quad + \sum_{i \in \text{Si group}} (N_i - 14) \left[\frac{(N_i - 14) Y_i}{Y_n} \frac{\partial Y_n}{\partial Y_{\text{NG}}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(Z_i - 14) Y_i}{Y_p} \frac{\partial Y_p}{\partial Y_{\text{NG}}} + \frac{Y_i}{Y(^{28}\text{Si})} \frac{\partial Y(^{28}\text{Si})}{\partial Y_{\text{NG}}} \right] \\ &\quad + \sum_{i \in \text{Fe group}} (N_i - 28) \left[\frac{(N_i - 28) Y_i}{Y_n} \frac{\partial Y_n}{\partial Y_{\text{NG}}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{(Z_i - 28) Y_i}{Y_p} \frac{\partial Y_p}{\partial Y_{\text{NG}}} + \frac{Y_i}{Y(^{56}\text{Ni})} \frac{\partial Y(^{56}\text{Ni})}{\partial Y_{\text{NG}}} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

(9) は行列で表現できる。その行列の上行列を計算してやると

$$\begin{aligned}\frac{\partial Y_n}{\partial Y_{\text{NG}}} &= \frac{Y_n}{\det \mathcal{A}} \left[\mathcal{M}^{\text{Si}} \mathcal{M}^{\text{Fe}} \mathcal{M}_{ZZ}^* \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{M}^{\text{Si}} \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}2} - \mathcal{M}^{\text{Fe}} \mathcal{M}_Z^{\text{Si}2} \right] \\ \frac{\partial Y_p}{\partial Y_{\text{NG}}} &= \frac{Y_p}{\det \mathcal{A}} \left[\mathcal{M}^{\text{Fe}} \mathcal{M}_N^{\text{Si}} \mathcal{M}_N^{\text{Si}} + \mathcal{M}^{\text{Si}} \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}} \mathcal{M}_N^{\text{Fe}} \right. \\ &\quad \left. - \mathcal{M}^{\text{Si}} \mathcal{M}^{\text{Fe}} \mathcal{M}_{NZ}^* \right] \\ \frac{\partial Y(^{28}\text{Si})}{\partial Y_{\text{NG}}} &= \frac{Y(^{28}\text{Si})}{\det \mathcal{A}} \left[\mathcal{M}^{\text{Fe}} (\mathcal{M}_{NZ}^* \mathcal{M}_Z^{\text{Si}} - \mathcal{M}_{ZZ}^* \mathcal{M}_N^{\text{Si}}) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{M}_N^{\text{Si}} \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}2} - \mathcal{M}_Z^{\text{Si}} \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}} \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}} \right] \\ \frac{\partial Y(^{56}\text{Ni})}{\partial Y_{\text{NG}}} &= \frac{Y(^{56}\text{Ni})}{\det \mathcal{A}} \left[\mathcal{M}^{\text{Si}} (\mathcal{M}_{NZ}^* \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}} - \mathcal{M}_{ZZ}^* \mathcal{M}_N^{\text{Fe}}) \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{M}_N^{\text{Fe}} \mathcal{M}_Z^{\text{Si}2} - \mathcal{M}_Z^{\text{Fe}} \mathcal{M}_Z^{\text{Si}} \mathcal{M}_Z^{\text{Si}} \right]\end{aligned}$$

$\mathcal{M}_{N,Z}^*$ はすべての QSE グループの中性子、陽子を足し合わせたものである。また \mathcal{M}^{Si} や \mathcal{M}^{Fe} についても同様で、すべてのグループについて足し合わせたものを定義してある。他の 12 個の方程式についても同様に解く。このように、QSE グループを仮定する事によって、グループアバンドムの時間発展を比較的容易に計算する事ができる。

4 Result

図 1 にはシリコン燃焼における定常状態 $Y_e = 0.480, T = 4 \text{ GK}, \rho = 10^7 \text{ g cm}^{-3}$ での、QSE と FULL network の mass Fraction の比較、図 2,3 には Large QSE(LQSE), Small QSE(SQSE) network と Full network との mass fraction の比を示す。LQSE とは QSE グループとしてシリコン、鉄グループを採用している。そのために独立元素は少ない。一方 SQSE は QSE として採用しているグループが少ない。その分、独立に追わなければならない元素が増える。つまり、より FULL network に近い。

これらの図を見ると、QSE network は Full network をよく再現していることが見て取れる。しかし LQSE の ^{57}Cu は外れている。原因としては考えられるのは、 ^{57}Cu が QSE の鉄グループの端に属しているからである。一方 SQSE は異常値ではない。SQSE において ^{57}Cu は FULL network を解いているためにこのような結果となった。

またこの反応では Q 値を $^{57}\text{Cu}(\gamma, p)^{56}\text{Ni}$ の逆反応から決定し、採用している。しかし "winvn" と呼ばれる reaction library の正しい値を使うと、mass fraction の比は 1.0002 となる事が分かった。

また表 1 は各 CPU に対する FULL NETWORK と QSE NETWORK の計算スピードの比較である。これを見ると分かるが、QSE は正確なアバンドムの見積もりをした上で、計算コストを大幅に削減している事が分かる。また LQSE に比べて SQSE の方が計算コストが高くなっているのは、SQSE の方が LQSE より独立核子として計算している数が多いためである。

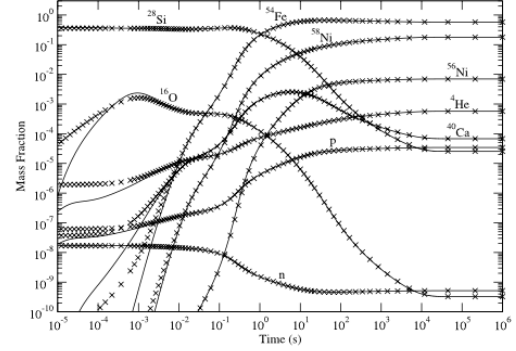


図 1: —シリコン燃焼の定常状態での LQSE network と FULL network の比較。線は FULL network で × は LQSE network である。

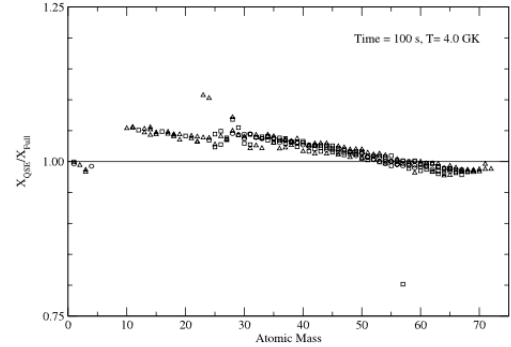


図 2: —シリコン燃焼の定常状態での LQSE network と FULL network の mass fraction の比較。

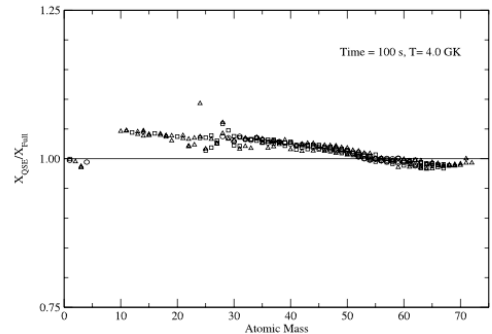


図 3: —シリコン燃焼の定常状態での SQSE network と FULL network の mass fraction の比較。

表 1: 定常状態での各 NETWORK のスピード

NETWORK	OPTERON			ITANIUM 2			CORE DUO			PENTIUM 4		
	CPU Time (s)	Matrix Time (%)	Iteration Count	CPU Time (s)	Matrix Time (%)	Iteration Count	CPU Time (s)	Matrix Time (%)	Iteration Count	CPU Time (s)	Matrix Time (%)	Iteration Count
Vendor-Supplied Solver												
LQSE.....	1.69	12	1385	2.45	13	1385	1.84	27	1383	4.04	11	1385
SQSE.....	3.34	18	1849	5.10	22	1847	4.36	41	1593	8.19	20	1845
Full.....	9.92	84	1602	11.67	88	1599	26.83	90	1590	25.74	77	1581
Compiled Solver												
LQSE.....	1.85	20	1379	3.37	32	1378	2.14	29	1379	4.17	16	1379
SQSE.....	4.30	37	1892	7.79	49	1878	4.97	49	1883	9.37	28	1890
Full.....	29.27	95	1593	43.70	97	1572	41.64	93	1593	186.80	96	1592

図 5 には完全シリコン燃焼における FULL network の比較を示す。点線は温度が 3.5GK を示す。時間が経つにつれ、だんだん温度は下がる。両図を見ると、3.5GK までは FULL network とほぼ一致している。3.5GK 以下でフィットしないのは、温度の低下によって反応の進行が妨げられるからである。つまり QSE の崩壊が原因である。

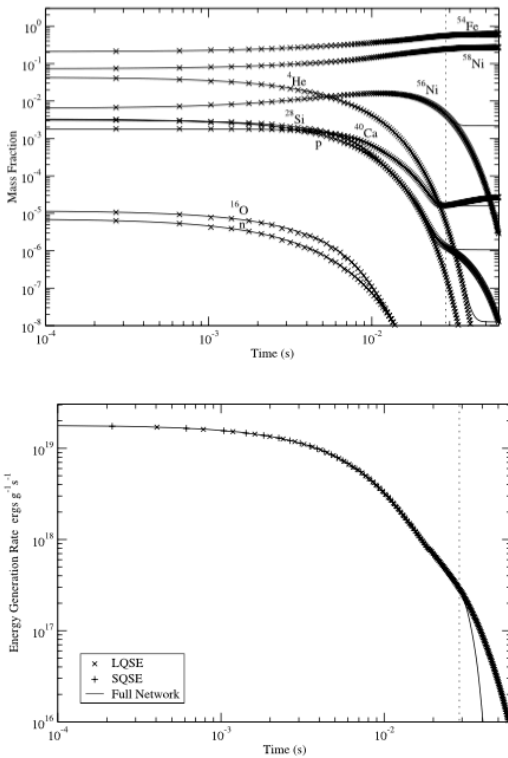


図 4: 完全シリコン燃焼における LQSE と FULL network との比較 (上手) とエネルギー生成率の比較 (下図)

5 Conclusion

本稿で Hix らは、シリコン燃焼において、QSE は独立核子を大きく減らして計算コストを減少させ、尚且つ元素合成によるエネルギー生成率やアバンドランスの進化の正確な見積もりできる事を立証した。SQSE は独立粒子を正確に発展させる事に成功した。一方 LQSE は精密さでは SQSE には劣るが、計算コストを大幅に削り、計算スピードを向上させる事を可能にした。しかしどの network においてもヤコビアンを計算するのに時間がかかるという現状は変わっていない。彼らはその点を改善して計算スピードをさらに速くしたいと考えている。また QSE network を使う事で、原子核の変数を減らす事ができる。それは流体モデルにおいて解かなければならない方程式の数を減らす事に繋がる。つまり QSE network は多次元流体モデル計算に適している。

参考文献

- [1] W.RAHAEEL HIX et al. • THE QSE-REDUCED NETWORK FOR SILICON BURNING Apj 667:476 2007
- [2] W.Raphael Hix et al The QSE-reduced Network Apj 1998