

モンテカルロ法による衝突輻射モデルの高速計算手法

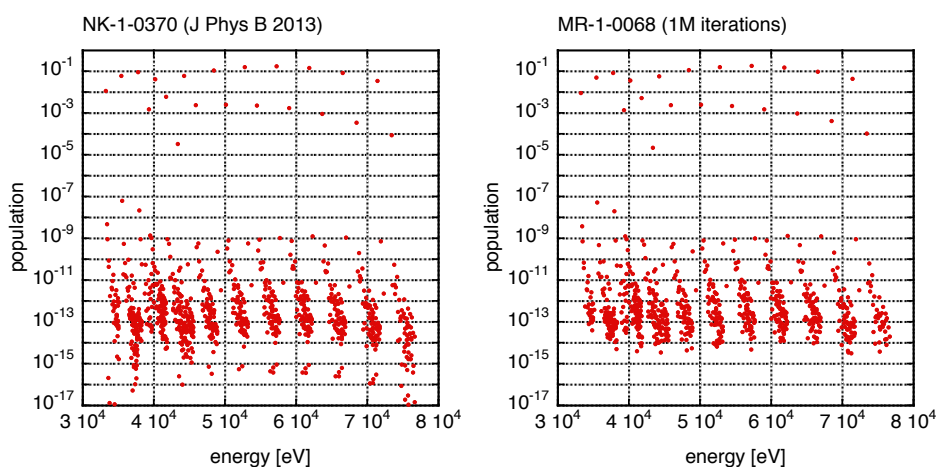
量研機構 佐々木明、LLNL R. More

核融合プラズマ中のタングステンの挙動の解析や、EUV リソグラフ光源の研究開発において、多価電離イオンの衝突輻射モデルが用いられている。本発表では、イオンアバンドンスやスペクトルを正確に計算するために用いる、数 1000 以上の原子状態を含む大規模な衝突輻射モデルの計算を高速化する手法について述べる。

従来方法では、すべての状態についてのレート方程式を立て、連立一次方程式を解いてポピュレーションを求めていたが、提案手法では、ある一個の原子に注目しその状態の変化を追跡することを考える。ある時点での原子の状態は、直前の状態のみに依存するマルコフ性を持つので、電子温度、電子密度が与えた条件で、状態変化を十分長い時間にわたって追跡し、原子が各々の状態に滞在する時間を求めれば、原子が各々の状態に存在する確率、すなわちポピュレーションが決定できると考えられる。

具体的には、まず、対象原子、イオンのエネルギー準位、衝突、輻射による電離、励起過程のレート係数を、HULLAC コードを用いて求める[1]。そして、原子が適当な初期状態に存在するとしてその減衰（消滅）の寿命を評価し、その時間が経過した時点ですぐにどの状態に遷移するかをモンテカルロ法により確率的に求める。この状態変化を多数回繰り返し、原子が各状態に滞在する時間を求める。

(図 1) に計算の結果の例を示す。提案手法による結果は、基底状態のポピュレーションについては従来手法の結果とほぼ完全に一致する一方、きわめてわずかしかなかった励起状態のポピュレーションは 0 になることを示す。提案手法による計算の時間は、状態数に比例して増加し、状態の数が 10^4 のとき従来手法の 1/100 であった。提案手法では、きわめてわずかしかなかった状態にプラズマの状態に影響を与えないと考えられる状態を実質的に計算から除外することによって、計算時間の顕著な低減が得られたと考えられる。



(図 1) 従来手法[2]と提案手法で計算したタングステンイオンのポピュレーションの比較。

$n_e=10^{14}/\text{cm}^3$ 、 $T_e=2\text{keV}$ 。横軸は中性原子を基準としたレベルのエネルギー。

参考文献

- [1] A. Bar-Shalom, et al. JQSRT 71, 169 (2001).
- [2] A. Sasaki et al., J. Phys. B 46, 175001 (2013).