

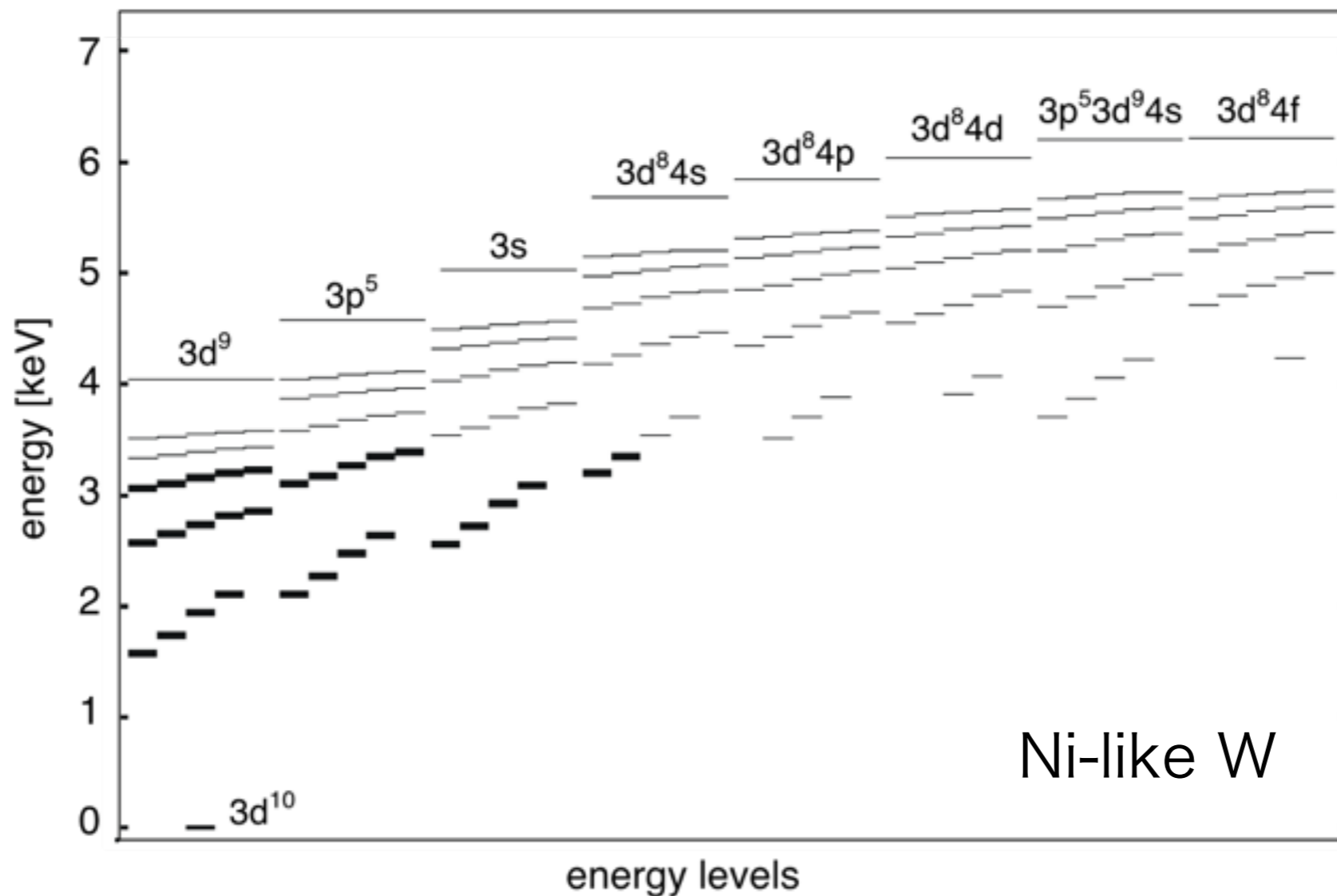
モンテカルロ法による衝突輻射モデル の高速計算手法

量研機構 佐々木明
LLNL R. More

本研究は「プラズマ中のタングステン発光構造への二電子性再結合過程の寄与の解明」
科研基盤B（代表者 村上泉）の支援を受けて行われた。

多価電離イオンの衝突輻射モデルの研究

- ・多価イオンの衝突輻射モデルは、X線レーザー、EUV光源、核融合プラズマの解析に用いられている。
- ・重原子の多価イオンは、複雑なレベル構造を持ち、多数の原子状態を考慮した計算が必要である。



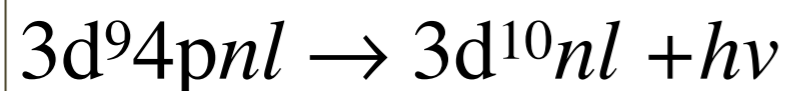
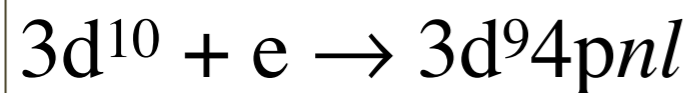
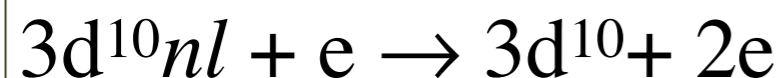
多価イオンのポピュレーションの計算方法

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{i \neq j} (F_{ji} N_j) - N_i \sum_{i \neq k} Q_{ik} = 0$$

$$\sum N_i = 1$$

$$\mathbf{A}N = x$$

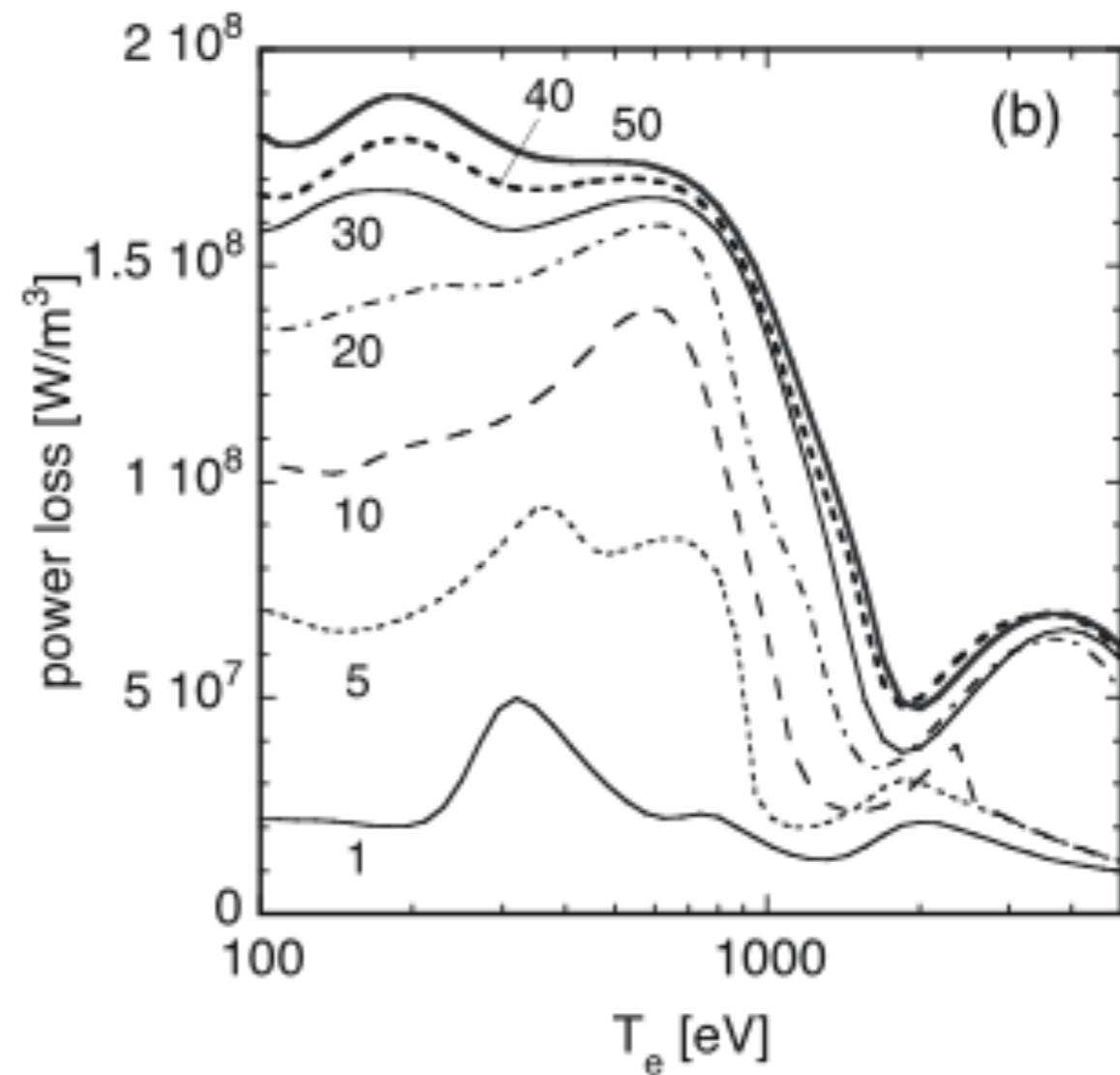
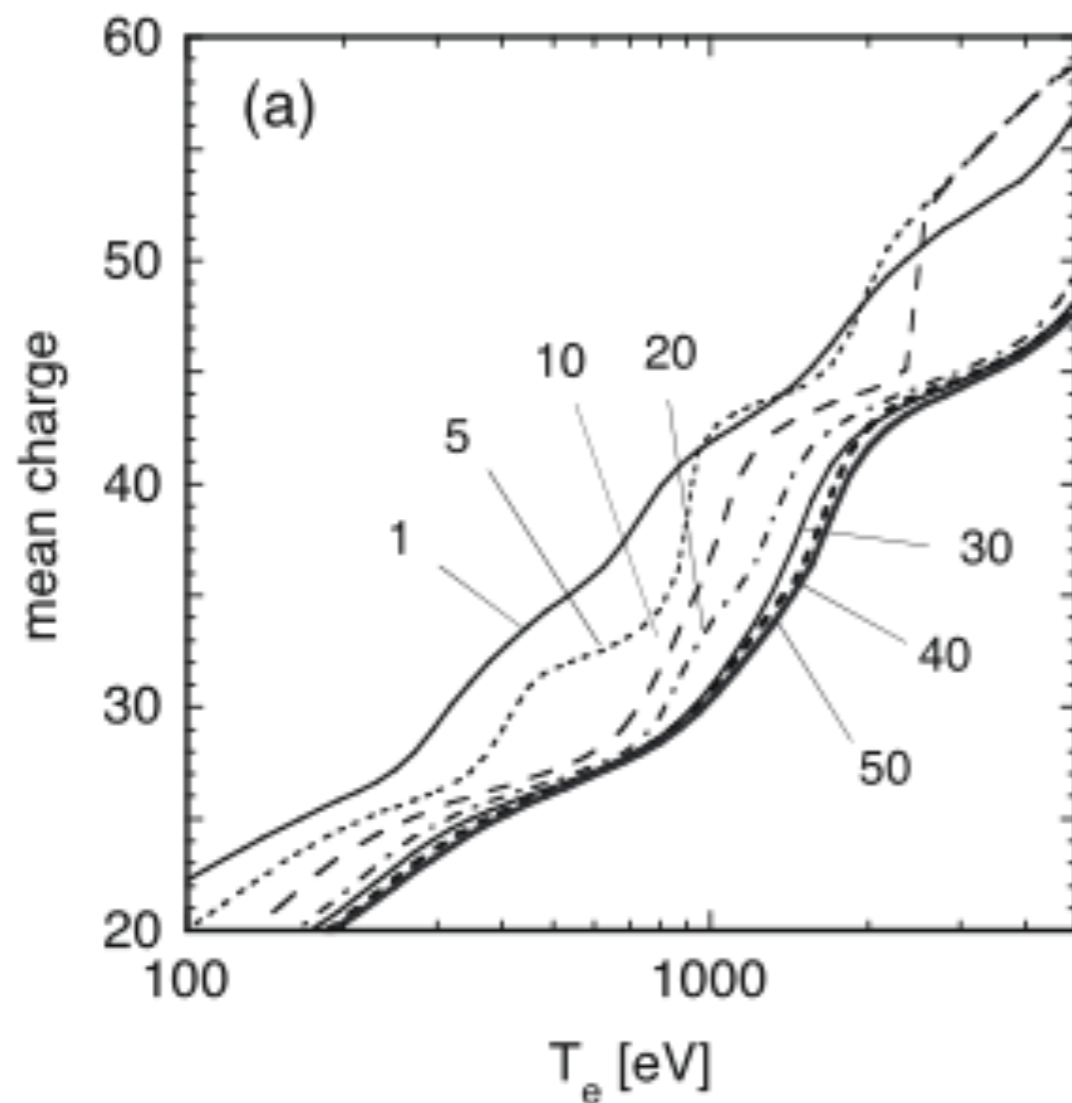
$$N = \mathbf{A}^{-1}x$$



- ・ プラズマ中に存在すると考えられる、状態のエネルギー、それぞれについての電子衝突、輻射による電離、励起過程のレート係数を、原子コードで求め、レート方程式を立てる。
- ・ ポピュレーションを連立一次方程式の解として求める。
- ・ ポピュレーションを正確に評価するために、多数の2電子性再結合チャンネルを考慮する必要がある。

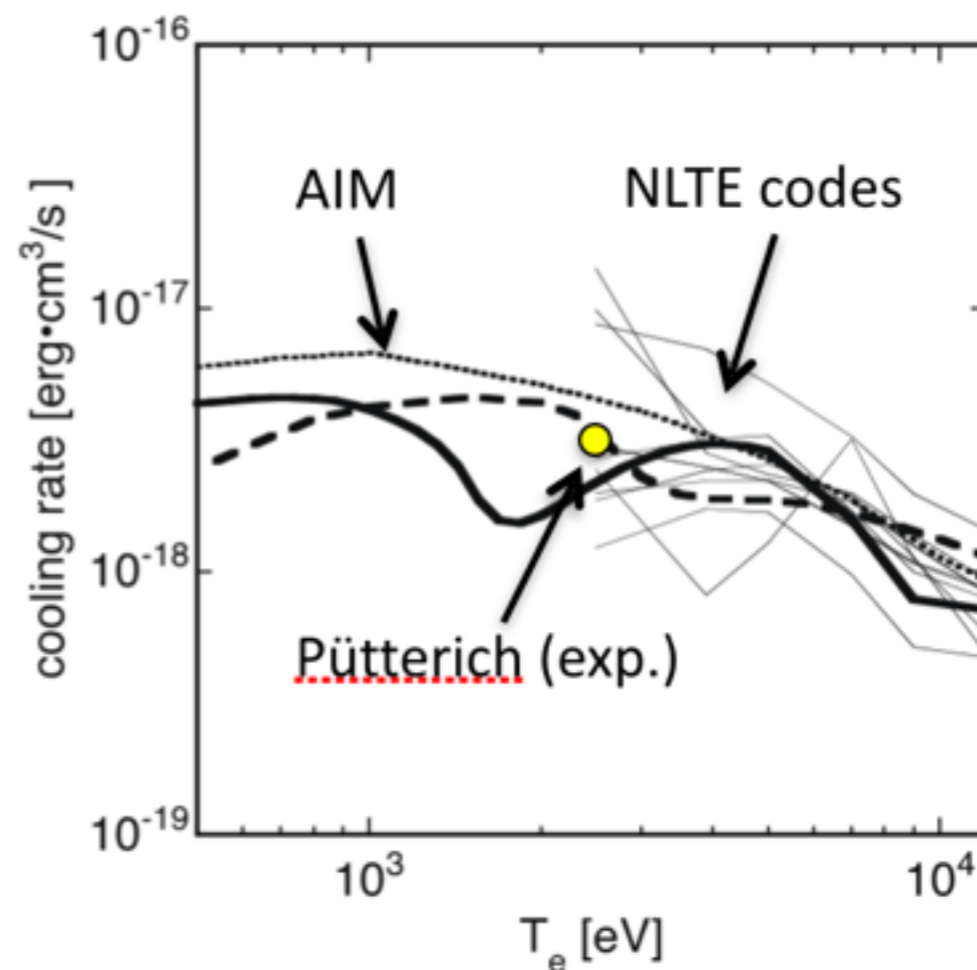
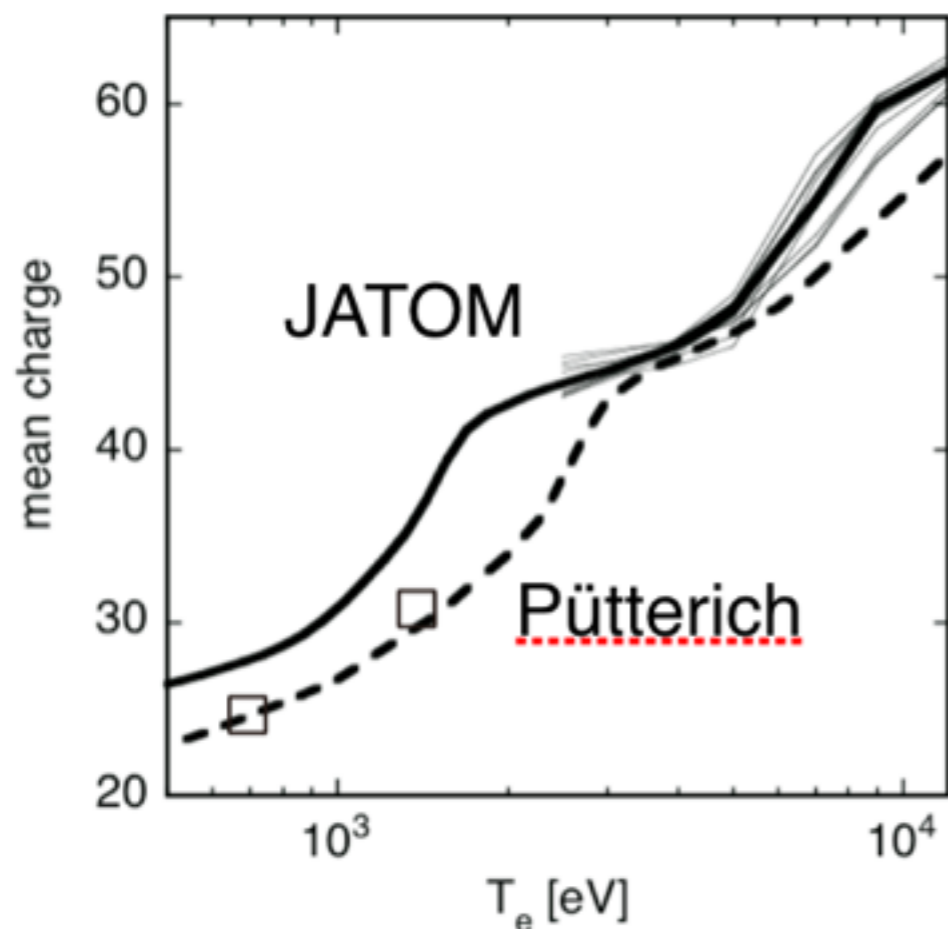
平均価数、輻射損失への2電子性再結合の効果

- ・より多くの2電子性再結合チャンネルを考慮することで、価数は低下、輻射損失は増加する。



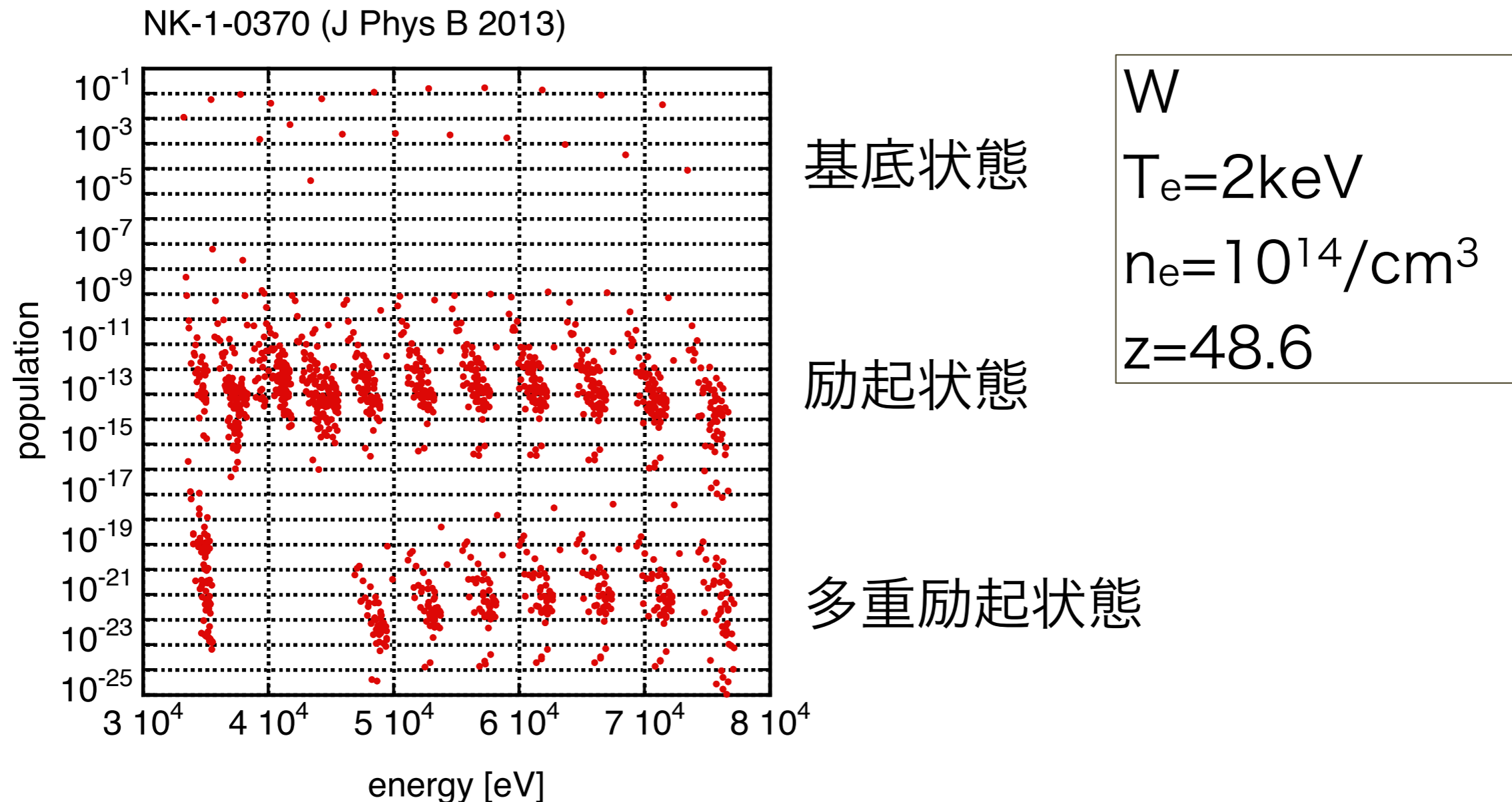
平均価数、 輻射損失の実験との比較

- ・分光計測技術の進展により、プラズマの平均価数、輻射損失に関する実験結果も徐々に得られるようになってきている。
- ・実験結果と計算の間に違いがあり、より多くの状態を考慮した計算、計算の収束性の検証が必要である。



核融合プラズマにおける多価イオンの衝突輻射モデルの特徴

- ・ 数千以上の状態を考慮する必要があり、計算負荷が大きい。
- ・ 計算負荷の大きい原因は、ポピュレーションが大きい基底状態と、小さい励起状態を同等に扱うことによる。



モンテカルロ法による衝突輻射モデルの計算

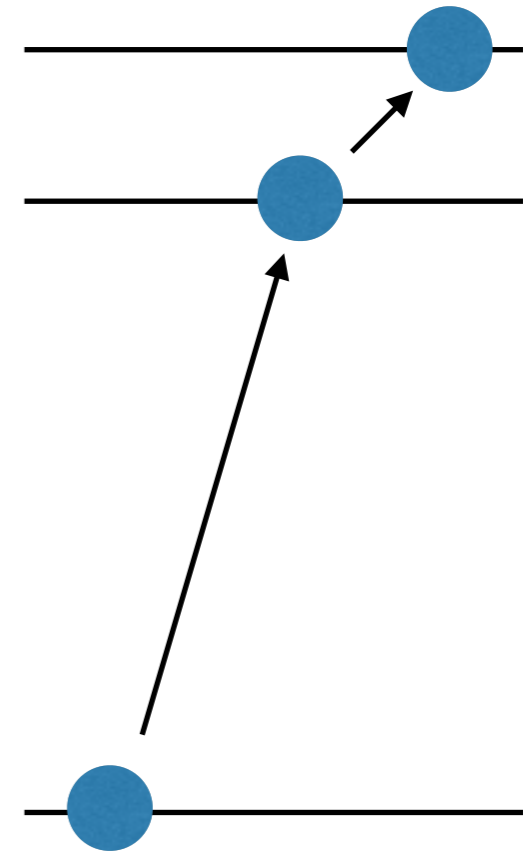
ポピュレーション分布を一度の計算で決めるのではなく、ある原子の状態の変化を追跡する。

それぞれの原子は、電離、励起過程を経て状態間の遷移を繰り返している。

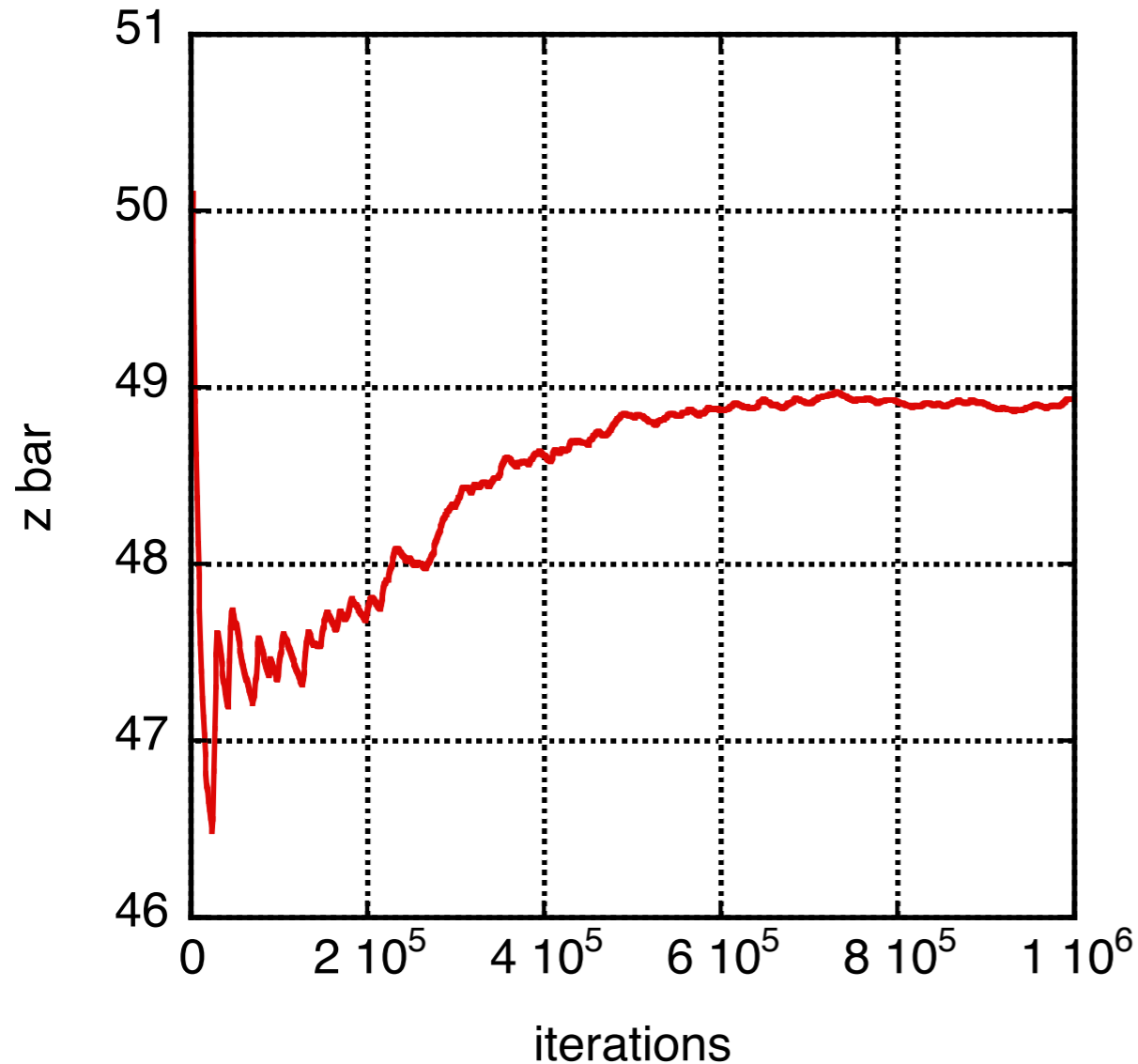
次の状態は直前の状態のみに依存（マルコフ性）

各状態の寿命を評価し、寿命だけの時間が経過したあと、次にどのような状態に遷移するかを確率的に決める。

遷移を十分多数回（ 10^6 ）繰り返すと、各状態に滞在する時間が、状態が存在する確率、ポピュレーションになる。



計算例



以前と全く同じ原子モデル（エネルギー準位とレート）を用い W イオンの状態の変化を計算。

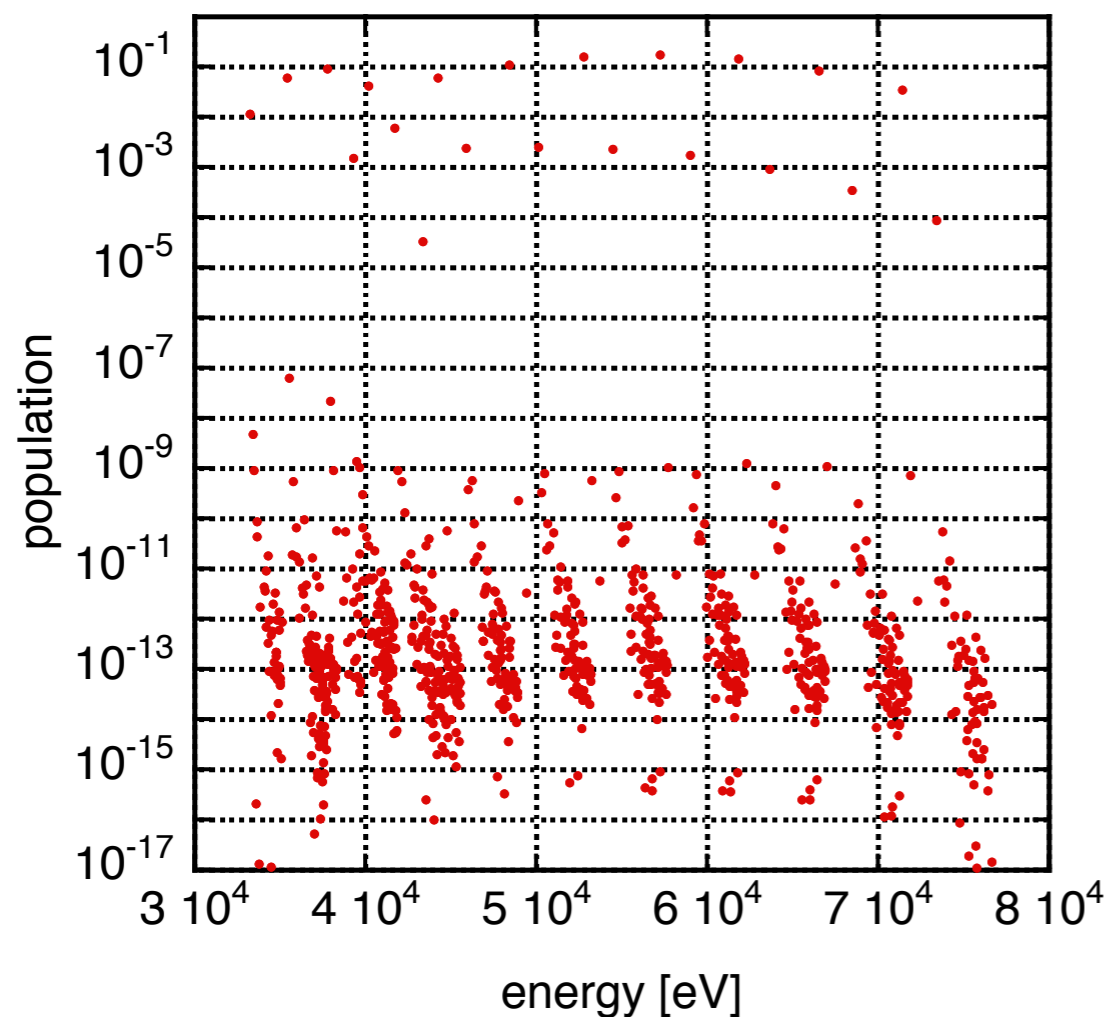
W
 $T_e = 2 \text{ keV}$
 $n_e = 10^{14} / \text{cm}^3$
 $z = 48.6$

ある反復回数までに経由する状態の平均として価数を求めると、 10^6 ステップくらいで収束し、以前と同じ結果となった。

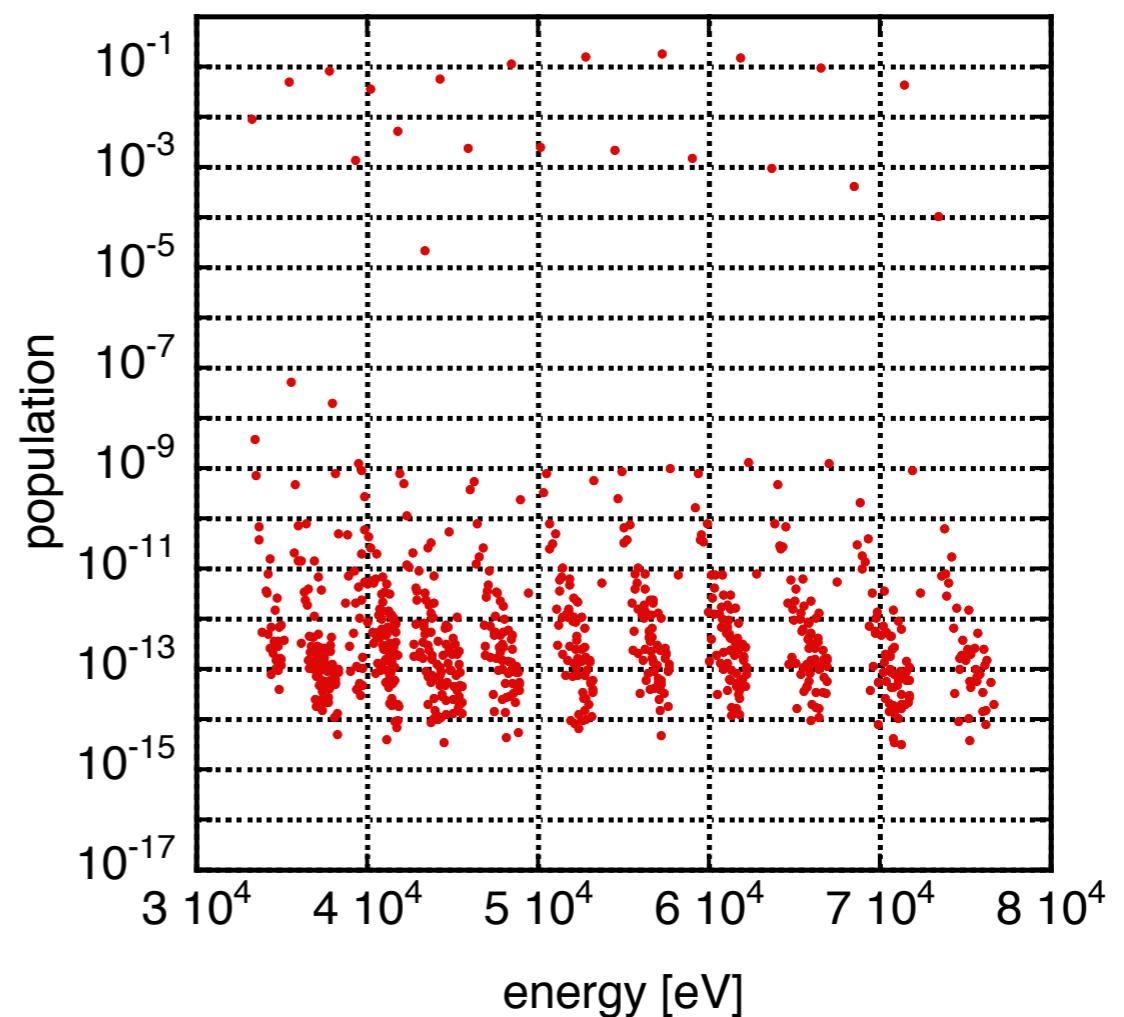
ポピュレーションの比較

- 計算結果は、ポピュレーションの大きい基底状態と低い励起状態については以前の計算とほぼ一致する一方、ポピュレーションが極端に少ない多重励起状態は無視された形となる。

NK-1-0370 (J Phys B 2013)

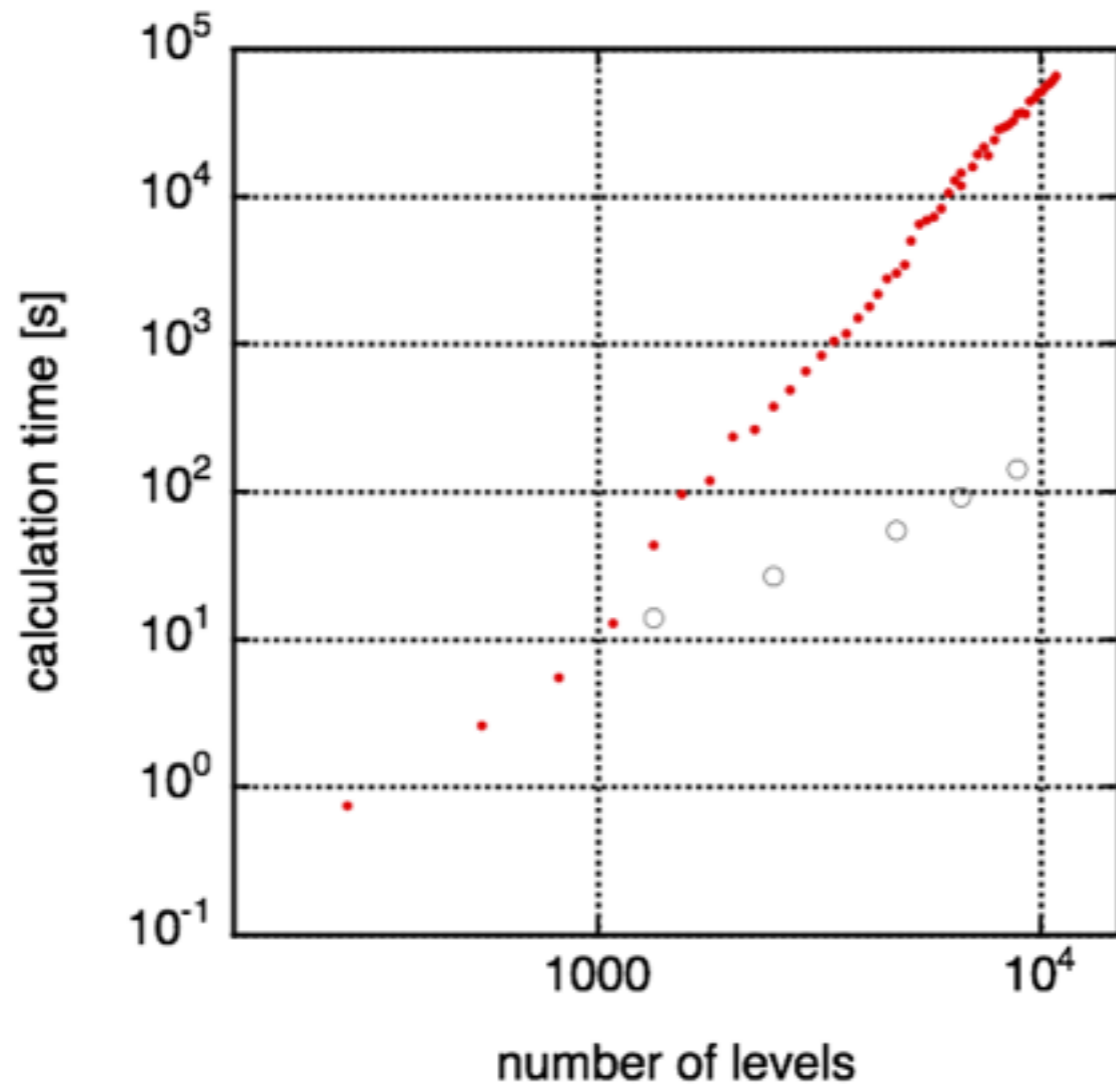


MR-1-0068 (1M iterations)



計算の性能

- ・モンテカルロ法での計算時間はレベル数に比例する。
- ・レベル数 10^4 で100s程度と従来比100倍の性能向上が得られた。



MC

* Apache commons math packageの性能が悪い。より良いライブラリを用いれば差は少ない可能性がある。

考察

- ・モンテカルロ法によって、衝突輻射モデルでポピュレーションを求める計算を高速化できる可能性がある。
- ・状態によってポピュレーションの大きさが非常に異なることを利用している。
- ・多くの状態を考慮する必要がある2電子性再結合の効果の評価のために役立つと考えられる。
- ・より試行の回数を増やすことで精度が高まると考えられる。個々の原子についての計算は独立で、並列計算による性能向上が期待できる。
- ・時間発展の計算にも応用可能と考えられる。電離、励起に必要な時間のゆらぎがアバNdansやスペクトルに影響を与えるかもしれない。

おまけ

従来は並列計算に向かなかったJavaに parallel stream機能が追加され、マルチコアを活用した並列化が簡単にできるようになった。

```
LinkedList<CRmodel> CRmodel=new LinkedList<CRmodel>();
```

```
...
```

```
... // たとえば個々の原子に関するデータ構造をここで定義
```

データをStreamの形にまとめてコアに転送

```
CRmodel.parallelStream()  
    .forEach(i -> calculate(i));  
}  
}
```

ラムダ式

並列化される処理とそのためにやりとりされるデータ（量と質）を明確、簡潔に記述

* MPIのような通信も、OpenMPのような指示行もない。並列処理可能なプログラムとデータの構造を作れば、自ずから並列化されるという機能。