

モンテカルロ法によるCRモデルの計算手法

佐々木明

量子科学技術研究開発機構・関西光量子科学研究所

衝突輻射 (CR) モデルは、プラズマ中の原子分子過程、ポピュレーションの解析、スペクトルの解析のために用いられている。CRモデルは、原子分子のエネルギー準位、衝突、輻射遷移のレート係数を用いて構築されるが、その解法は連立一次方程式を解く問題になるので、一般的な手法によって行うことができる。しかし例えば高Z原子の多価イオンのモデルのように多くの状態がある場合は、計算負荷が大きくなるので、効率的な計算方法を用いることは重要になる[1]。

プラズマ中の原子、分子は衝突、輻射遷移によって状態間を次々に移り変わっている。プラズマの温度、密度が一定なとき、原子、分子の状態は直前の状態にのみ依存するマルコフ過程の性質を持つので、モンテカルロ法によって効率的な計算ができる可能性がある。プラズマ中にある粒子 (原子、分子) の状態の時間変化に注目し、電離、励起などの過程のランダムな繰り返しをモンテカルロ法で評価すると、それぞれの状態へ滞在する時間の割合から、それぞれの状態に存在する確率、ポピュレーションが求められる。状態の変化を十分長時間、多数の原子、分子について観測すると、ポピュレーションを精度良く求めることができると考えられる。

一般的な連立一次方程式の解法でCRモデルの計算を行うと、計算時間は状態数の二～三乗に比例して増加する。これに対し、高Z原子の多価イオンの励起状態のポピュレーションはエネルギーが増すに従って急激に小さくなる。このようにポピュレーションの大きい状態が常に少数という性質がある場合、モンテカルロ法による解法を用いると、計算時間は状態数に比例して増加し、状態数が大きくなった時大きな性能の向上が得られることが期待される[2]。

講演では、この方法を時間依存のポピュレーションの計算や、輻射輸送の計算に応用する可能性についても触れる。このようなモンテカルロ法による解法では、粒子 (原子、分子) に対する計算は独立なので、並列計算のメリットを活かすことができると考えられる。

References

- [1] A. Sasaki, High Energy Density Phys. 9, 325 (2013).
- [2] A. Sasaki, et al. High Energy Density Phys. 32, 1 (2019).