

反応性電離気体挙動の多粒子シミュレーション

大西 輝明

CRC総合研究所^{*)}

Multi-Particle Simulation for the Behavior of Ionized Gases with Reactivity

Teruaki OHNISHI

CRC Research Institute, Inc.

Abstract

A multi-particle model was developed to simulate a reactive system participating in the creation and annihilation of charged particles, where physico-chemical quantities rapidly vary with space and time. Quantities associated with model particles were spatially smoothed by the method of 'Smoothed Particle Hydrodynamics'. It became clear, from a case study of a large-scale electric discharge in the air, that this method is successfully applicable to specific problems which are difficult to be solved by any method using spatial meshes.

1. はじめに

電離気体に係る生成消滅反応速度は、局所物理量に非線型に依存するとともに、局所的な気体の運動は系全体にわたる電離気体の密度分布にも強く依存して決まる。この傾向は、例えば放電過程などにおいて典型的に表出し、大きい電場勾配を持つ中心部では、電離反応速度が局所電場や気体圧力などの動揺に関して指数関数的に変動する。また、発生した電離気体は局所温度のべき乗に比例して再結合し、さらに、電場に支配されて移流し、拡散する。電離気体の密度は系全体の電場分布や新たな電子なだれ領域を決定づけ、それらは再び自身の密度分布を決定づける。この種の空間的、時間的に急速に変動する物理化学現象を、メッシュを用いる手法でシミュレートすることは非常に困難である。ここでは系を、運動する粒子の集合体としてとらえるものとし、この多粒子モデルによって、上記電離気体の挙動をシミュレートする方法を提案する。

2. 定式化

複数種の荷電粒子が互いに相互作用する系において、化学種 i の局所数密度 n_i 、移流速度 v_i 、および温度 T_i などの時間空間変動は、以下の保存方程式で記述できる：

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot (v_i n_i) - D \nabla^2 n_i = \dot{n}_i, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (m_i n_i v_i) + \nabla \cdot (m_i n_i v_i v_i) + \nabla \cdot p_i = e_i n_i E - \sum_j \frac{m_i m_j}{m_i + m_j} n_j \nu_{ij} (v_i - v_j), \quad (2)$$

^{*)} 〒136 東京都江東区南砂2-7-5 Tel: 03-3634-5796 Fax: 03-5634-7338

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \{n_i (\frac{3}{2}kT_i + \varepsilon_i)\} + \nabla \cdot \{n_i \mathbf{v}_i (\frac{3}{2}kT_i + \varepsilon_i)\} + p_i \nabla \cdot \mathbf{v}_i + \nabla \cdot \mathbf{f}_i \\ = j_i \cdot \mathbf{E} - \sum_j n_i \nu_{ij}^* k(T_i - T_j), \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 $\dot{n}_i$ は考慮する化学過程によって決まる化学種の生成消滅項、 ε_i は内部エネルギー、 $\mathbf{f}_i$ は化学種 i の流れによる熱流、 j_i は伝導電流、 ν_{ij} および ν_{ij}^* はそれぞれ、粒子 j との衝突による運動量輸送およびエネルギー輸送頻度である。放電化学について議論する場合、上記の変量 $\dot{n}_i$ は電子なだれによる衝突電離反応、解離型二体付着反応、イオン-イオンおよびイオン-電子の再結合反応、熱解離反応、および中性粒子との衝突による解離反応等からの寄与の和として与えられる。また、局所電場 $\mathbf{E}$ は系全体にわたる荷電粒子の分布状況に左右され、その空間変動は以下の式で与えられる：

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\sum_i e_i n_i / \varepsilon_0, \quad (4)$$

ただし、 e_i は電荷、 ε_0 は当該気体の誘電率である。

化学種 i に単位時間当たり移行するエネルギー量、 $j_i \cdot \mathbf{E} - \sum_j n_i \nu_{ij}^* k(T_i - T_j)$ のうち、有限な分率 g は化学種 i の振動励起エネルギーに転化し、 $(1-g)$ の分率のみが直ちに熱エネルギーとなる。従って、脱励起頻度が衝突励起頻度に比して充分に小さい場合には、励起状態はエネルギーリザーバーとなり、励起分子を別種の化学種として導入する必要がある。上式(3)は、こうした準安定な振動励起状態を考慮したものではない。

3. ケーススタディ：大気中での放電現象

放電現象研究の歴史は古いが、放電部の物理化学的構造の議論は少ない。以下では、大気中での放電チャネル先端で生ずる荷電粒子反応を例としてモデル化し、定常状態到達時には放電部での諸物理量がいかに空間分布しているかについて検討する。

3. 1 モデル

大気中放電は構造的に、電荷の供給経路となるチャネル部と、その先端の電子なだれ発生部とに大別できる。後者の進展によりチャネル部が延長し、放電経路が大気中に延びる。チャネル先端部電場は、電子なだれを持続させ得る程に充分に高い。この高電場は、チャネル部を介して流入した電荷がその先端部に多量に蓄積した結果であるとも考えられる。従って、放電の進展が定常状態にある場合には、第零近似として、チャネル先端部に点状の単一符号電荷が存在する状況を考えればよいであろう。電子なだれはこの点電荷（一般には負符号）の周囲に発達するので、この電荷の近傍では、電子なだれによって発生した正負電荷は分極し、点電荷に近い位置である程、実質的な正の電荷密度は大きい値を持つ。従って、定常状態にある放電先端部は、おおそFig. 1 のようになる。

3. 2 数値計算方法

当問題を、粒子モデルを用いて数値的に解く。個々の粒子は空間を離散的に移動するが、その運動に係る諸物理量は、空間内で連続的に変化しているものとする。初めに、式(1)–(4)の両辺を、化学種 i の第 k 番目粒子が時刻 t において占有する微小体積区間 V_{ik} で積分を行う。このとき、 V_{ik} が充分に小さい場合、例えば式(1)は以下のように書き換えられる：

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int n_{ik} dV_{ik} \right) + \nabla \cdot \left(\bar{\mathbf{v}}_i \int n_{ik} dV_{ik} \right) - \bar{D} \nabla^2 \left(\int n_{ik} dV_{ik} \right) = \bar{\dot{n}}_{ik} V_{ik}, \quad (5)$$

ここで、バーは体積 V_{ik} 内での平均値を示し、 $\int n_{ik} dV_{ik} \equiv n_{ik}$ はモデル粒子 k で代表される化学種 i の個数である。量 V_{ik} は、粒子 k の局所的な数密度 $N_{ik}(\mathbf{r}_{ik}; t)$ の逆数で与えられるものであり、当該粒子が移流して相対位置を変動するにつれて、 V_{ik} 値は時間的に変動する。また、モデル粒子の電荷 Q_{ik} は $Q_{ik} = e_i n_{ik}$ 、質量 M_{ik} は $M_{ik} = m_i Q_{ik} / e_i$ となる。以下では、体積 V_{ik} 内での $\bar{\mathbf{v}}_i$ 、 $\bar{T}_i$ などの諸物理量の平均値は、粒子 k の有する ($\mathbf{v}_{ik}$ 、 T_{ik} などの) 物

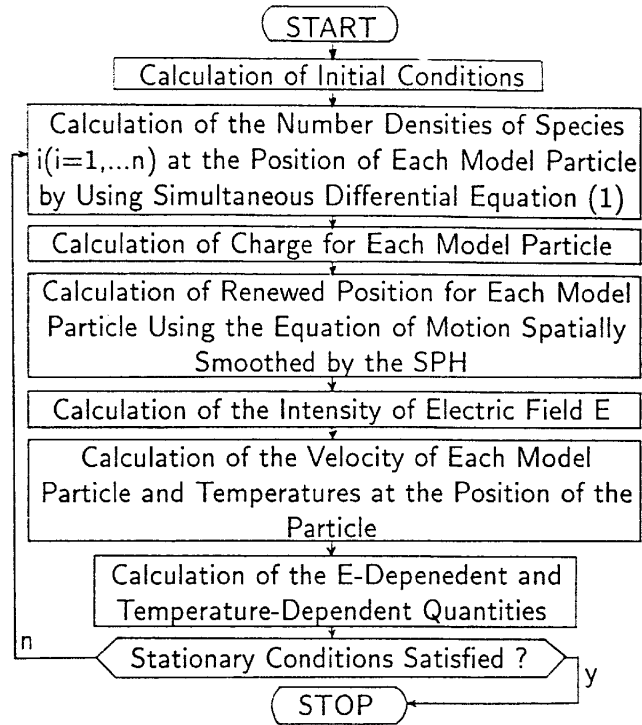
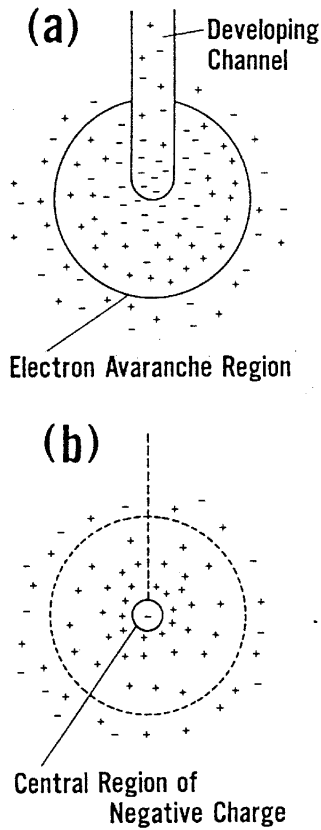


Fig.1(left) Schematic figure of the discharge (a), and a model for its zero'th approximation (b)
Fig.2(above) Calculational procedure

理量に等しいとする。このとき、局所場 r_{ik} における電場 $E(r_{ik}) \equiv E_{ik}$ は、 $E_{ik} = -\sum_i \sum_j Q_{ij} r / (\epsilon_0 r^3)$ となる。ただし、 $r = |r| \equiv |r_{ij} - r_{ik}|$ である。

一般に、系を構成するモデル粒子数が少ない場合、個々の粒子の物理量、特に速度、粒子位置での電場強度等についての空間揺らぎは大きい。このため、運動量およびエネルギー保存式の積分では、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 手法 [1] を用いて物理量の平滑化を行うものとする。この場合、球対称型のスプライン核を使用する。また、近接するモデル粒子によって不自然に高い局所電場が発生することをさけるため、任意の粒子間でソフトニングパラメータの α も導入する。このとき、電場 E_{ik} は $E_{ik} = \sum_i \sum_j Q_{ij} r / \{r (r^2 + \alpha^2) \epsilon_0\}$ で与えられるが、更にスプライン核を導入して、これに空間的な平滑化を施すものとする。この種の平滑化は、重力相互作用する二物体間のポテンシャルの平滑化と基本的には同一である。

諸物理量の初期空間分布を与えれば、運動方程式(5)を時間的に積分することで、粒子系の動力学が解明できる。ここでは放電先端部の定常状態構造を得るために、従来の解析結果 [2,3] を参照して、電場、荷電粒子密度などの物理量の初期空間分布を見積る。荷電粒子のこの空間分布を重みとして、系内にランダムに n 個のモデル粒子を配置する。このとき、モデル粒子に対応する化学種は簡単のために一種類であるとし、この粒子の電荷および符号を $q_k = (n_+ - n_- - n_e) / N$ に等しいとする ($k = 1, \dots, n$)。ただし、 n_+ 、 n_- は正負イオンおよび電子の数密度である。更に、これらのモデル粒子の電荷と中心点電荷とが、初期電場を形成し得るように中心点電荷値を決定する。 q_k の符号は時間、場所と共に変化するが、点電荷近傍では $q_k > 0$ となることが予想される。中性分子はバックグラウンド気体として偏在するとし、気体温度はイオンおよび電子との非弾性衝突、および熱拡散などに支配されて決まる。

以上の方法で算出した初期値を用い、更に Fig. 2 に示した手順によって、粒子系が定常状態に到達するまで運動方程式を時間的に積分する。定常状態の判定は、荷電粒子による電場からのエネルギー抽出率と衝突によるエネルギー損失率とが、系全体にわたって等しくなること、および、系全体で、モデル粒子の平均速度の時間変化が十分に小さくなること

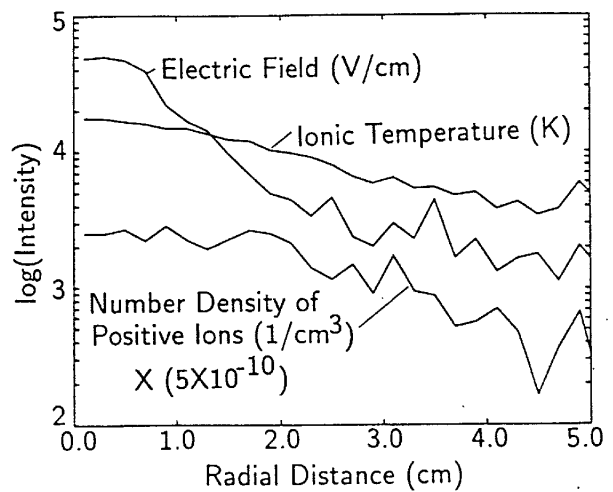
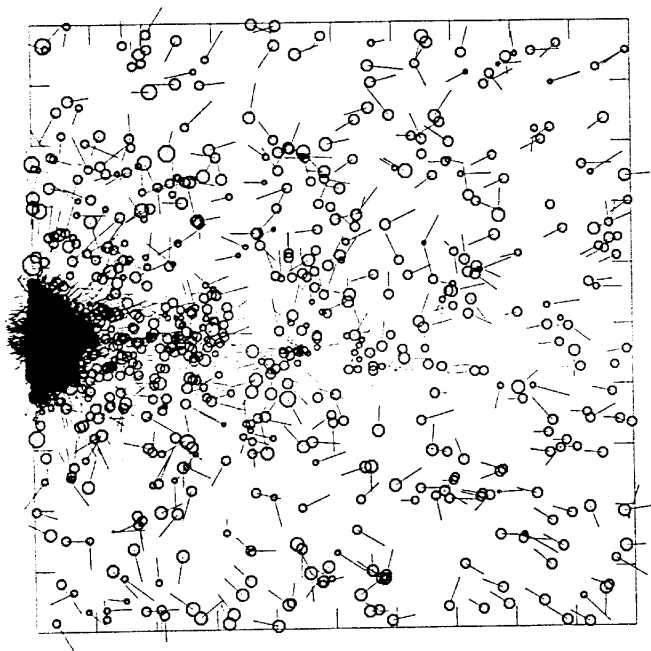


Fig.3(left) Spatial distribution of model particles

Fig.4(above) Radial distribution of physical quantities at $t = 1.25 \times 10^{-7}$ s

の二条件によるものとする。時間ステップの切り方は文献〔1〕に準ずるものとし、投入するモデル粒子数が多い ($n > 10^3$) 場合には、Hierarchical Tree Method〔4〕により局所電場を算出するものとする。また、モデル粒子は軸対称性を持った空間分布であるとして、電場計算を実施する。

3. 3 結果例

Fig. 3に、 $n = 4^6$ とした場合の定常状態でのモデル粒子の空間分布を示す。全体系は一辺20cmの正方二次元領域であり、図は、計算開始後 1.25×10^{-7} 秒後における中心近傍の一辺4.0 cmの正方領域の状況を示す。対称軸は左縦軸であり、各モデル粒子の持つ電荷 Q_k (最大値 $3.4 \times 10^6 \text{ C} \cdot \text{cm}^3$) の対数値に比例した小円で粒子位置を、移流速度 (最大値 $4.6 \times 10^8 \text{ cm/s}$) を小円に付随した線分で示した。初期条件からこの時点に至る迄に、各モデル粒子は平均約160回だけ空間移動した。更に、この時点で系全体から放出されるエネルギーは $2.7 \times 10^{12} \text{ erg/s}$ 、中心部での平均放出エネルギー密度は $7.9 \times 10^{12} \text{ erg/s/cm}^3$ となる。

イオン、電子および中性粒子の数密度や温度、電場の強さなどの空間分布は、各モデル粒子に付随する (粒子位置での) これらの物理量をもとに算出できる。Fig. 4に例として、正イオンの数密度およびイオン温度、および電場強度の動径方向分布を示す。

4. おわりに

SPH法を用いて空間的な平滑化を行うことにより、時空的に強く変動する反応性の系、例えば荷電粒子の生成消滅に係る反応系の様相などをシミュレートする粒子モデルを提示した。この種の多粒子モデルは、大気中放電先端部構造の計算例に見るように、固定した空間メッシュを用いる方法では追跡が困難であるような問題に適用して、十分に効果的であることがわかった。

参考文献

- [1] L. Hernquist and N. Katz: *Astrophys. J. Suppl.*, 70(1989), 419.
- [2] M. M. Kekez and P. Savic: *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 7(1974), 620
- [3] I. Gallimberti: *J. de Phys.*, C7(1979), 193.
- [4] J. Barnes and P. Hut: *Nature*, 324(1986), 446.