

離散データの多項式補間 —電子衝突による水分子イオン化反応への適用—

田所裕康[†]

【要旨】 本論文では、数値解析の基礎的手法である多項式補間法を用いて離散データとの誤差評価を行う。離散データとして、宇宙プラズマ中の化学反応の代表の一つともいえる電子衝突による水分子のイオン化反応に着目する。実験を中心として得られた離散データは、電子と水分子の衝突確率の指標であるイオン化衝突断面積を用いる。2次から9次までの多項式補間を評価したところ、イオン化衝突断面積のピーク値(100eV)で分割した方が、実験データと解析値の誤差が小さくなることがわかった。また、多項式の次数が上がるほど誤差は小さくなることがわかった。計算機資源の限られるシミュレーション研究などで用いる際は2次の多項式で十分であることがわかった。他の化学反応や中性粒子種における同様の評価は今後の研究課題である。

【キーワード】 多項式補間、離散データ、数値解析、イオン化反応、宇宙プラズマ

1. はじめに

一般に実験や観測で得られるデータは離散的である。得られなかった値を推定する際に補間法は用いられる。数値解析の基礎的手法とも言える補間法によって得られた連続データは、データの真のトレンドを理解したり、シミュレーションなどにおいて入力パラメータとして使用したり、また実験や観測で得られなかった値そのものを利用したりと多くの場面で有用である。

本研究では、宇宙プラズマ中の化学反応に関する離散データを補間することに着目する。宇宙空間は低密度ではあるが電離したプラズマや中性粒子が分布しており、衝突を介して様々な相互作用を起こしている。宇宙プラズマ中では電子と陽子が基本的な構成物質である。電子はプラズマ同士の相互作用以外に、そのエネルギーに応じて中性粒子と相互作用を引き起こす。一般に中性粒子の種類によらず、電子の比較的低エネルギー領域(数

十eV～100eV程度)においては弾性衝突が支配的であり、100eV以上のエネルギー帯においてはイオン化反応が支配的となる。本研究ではイオン化反応に着目する。また衝突の対象となる中性粒子として、水分子に着目する。水分子は、地球のみでなく太陽系の惑星圏(木星や土星など)においても直接観測されている比較的一般的な物質であるといえる。

電子衝突による水分子のイオン化反応に関しては様々な実験データが存在している。本研究ではItikawa and Mason [2005]の論文¹⁾の表11にまとめられている推奨データを用いる。これらの推奨データは実験データを中心とした離散データである。これら推奨データを図1に示す。横軸は電子のエネルギー[eV]であり、縦軸は衝突断面積[cm²]である。衝突断面積は、衝突の発生確率の指標のようなもので面積の次元を持つ。

このような離散データを連続データとすることはシミュレーション研究などにおいて入力パラ

[†] 駿河台大学メディア情報学部

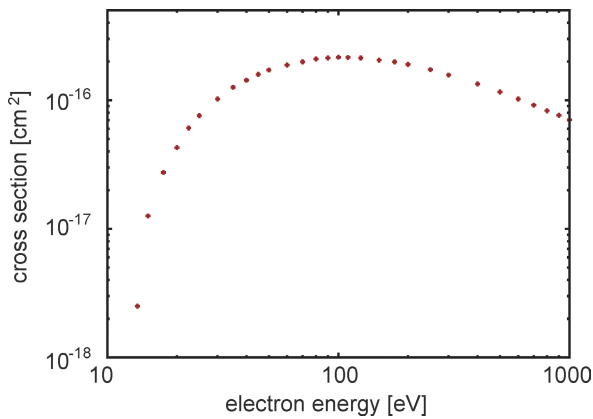


図1 電子衝突による水分子のイオン化衝突断面積 (Itikawa and Mason [2005] の推奨データをもとに作成¹⁾)

メータ決定の一助となることが考えられる。これらの意義を踏まえて、本研究では、図1の離散データに多項式補間を適用して誤差評価することを目的とする。

2. 多項式補間を用いた誤差評価(全エネルギー)

本論文で用いる補間法は多項式補間である。補間多項式 $p(x)$ は以下のように表すことができる。

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i x^i \quad (1)$$

a_i は係数、 i は次数である。本研究では、2次から9次までの多項式の次数で評価する。

図2の実線は、9次の多項式補間を用いた結果を示している。横軸は電子エネルギー [eV]、縦軸はイオン化衝突の衝突断面積 [cm²] である。離

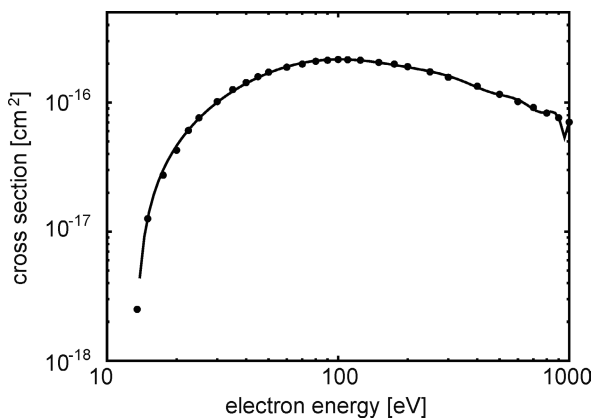


図2 多項式補間(9次)を用いた連続データと離散データ

散データは図1と同様である。図示されている電子エネルギー範囲における9次の多項式と離散データとの誤差は 2.16×10^{-18} [cm²] であった。この誤差は多項式の次数が上がれば上がるほど小さくなることがわかった。図2から概ね補間がうまくできているように見えるが、1000eV付近においては離散データからの誤差が大きいことがわかる。

3. エネルギーごとに分割した場合の誤差評価

一般にイオン化反応は中性粒子種によらず電子エネルギーが100eV付近に衝突断面積のピークを持つ形状をしている。そこで、衝突断面積のピーク値を中心として低エネルギー側と高エネルギー側に分割して、多項式補間を用いた誤差評価を行う。本研究で着目している水分子のイオン化断面積は100eVで最大値を持つ。

100eV以下の低エネルギー側における補間法による結果を図3に示す。横軸は電子エネルギー [eV]、縦軸はイオン化衝突の衝突断面積 [cm²] を示している。図2と同様に最も誤差の小さかった9次の多項式補間の結果を示している。図示されている電子エネルギー(100eV以下)における9次の多項式と離散データとの誤差は 5.91×10^{-19} [cm²] であった。図2における誤差 (2.16×10^{-18} [cm²]) よりも桁で誤差が小さくなっていることがわかった。

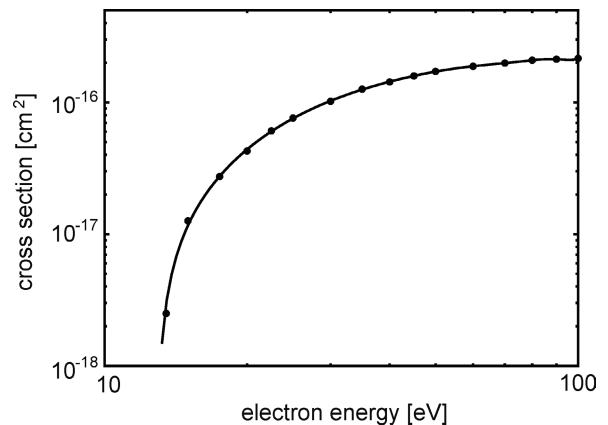


図3 100eV以下における多項式補間(9次)を用いた連続データと離散データ

100eV以上の高エネルギー側における補間法(9次)による結果を図4に示す。横軸は電子エネルギー [eV]、縦軸はイオン化衝突の衝突断面積 [cm^2]である。図示されている電子エネルギー(100eV以上)における9次の多項式と離散データ

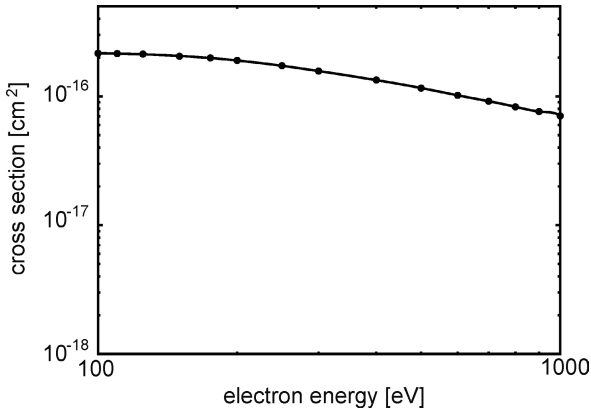


図4 100eV以上における多項式補間(9次)を用いた連続データと離散データ

との誤差は $3.95 \times 10^{-19} [\text{cm}^2]$ であった。こちらも図2における誤差 ($2.16 \times 10^{-18} [\text{cm}^2]$)よりも桁で誤差が小さくなっていることがわかった。また図3の低エネルギー側の誤差 ($5.91 \times 10^{-19} [\text{cm}^2]$)と比較すると桁の違いはないことがわかった。

4. 誤差評価に関する結果と考察

図5に本研究で調査した2次から9次までの多項式補間と離散データの誤差を示す。横軸は補間多項式の次数、縦軸はイオン化衝突断面積の離散データとの誤差 [cm^2]である。丸印は図2で示したような電子の全エネルギーにおける範囲で評価したものである。四角は図3で示したような電子が100eV以下の低エネルギー側でのみ評価したものである。三角は図4で示したような電子が100eV以上の高エネルギー側でのみ評価したもの

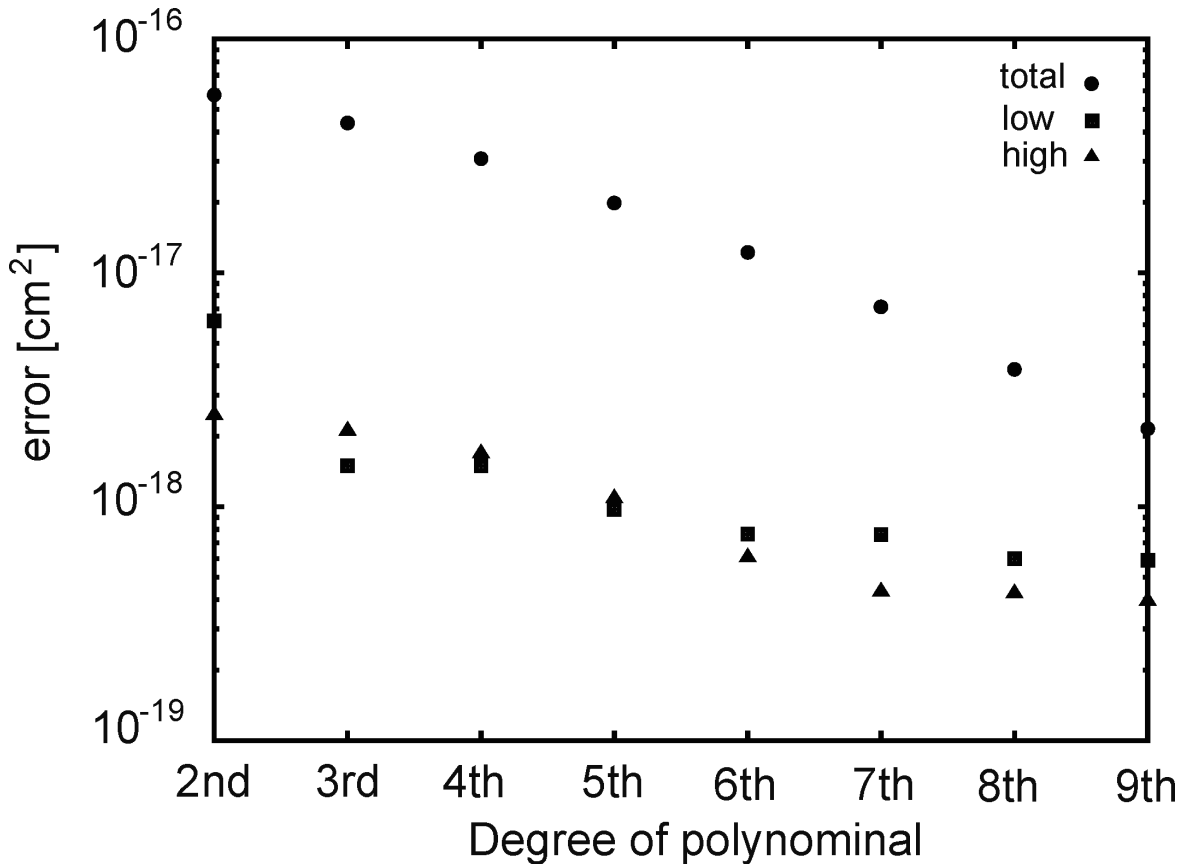


図5 多項式補間の次数ごとの誤差評価
 (● 全エネルギー ■ 低エネルギー (100eV以下) ▲ 高エネルギー (100eV以上))

である。低エネルギー、高エネルギーの2つに領域を分割した方が誤差は1桁程度小さいことがわかる。よってイオン化衝突断面積のピーク値で分割して多項式補間をした方が、誤差が小さくなることがわかる。

また図5より、多項式の次数が上がれば上がるほど誤差が小さくなることがわかる。しかしながら、高次の多項式を用いれば大規模シミュレーションなどにおいては計算機資源を消耗するため、必ずしも高次の多項式を用いれば良いというわけではないと考えられる。本研究で参照した実験を基にした推奨離散データの誤差は6%である¹⁾。この記述を基に誤差評価を行う。推奨離散データのピーク値は100eVにおいて 2.16×10^{-16} [cm²]である。この6%が誤差であるため、 1.296×10^{-17} [cm²] (2.16×10^{-16} [cm²] $\times 0.06$) の誤差となる。つまり、実験を基にした推奨データの誤差は、100eVにおいて 1.296×10^{-17} [cm²]であるため、これより小さい値で補間法の誤差を議論しても意味がないことがわかる。 1.296×10^{-17} [cm²]の誤差を適用すれば、多項式の次数は2次でも十分であることがわかる。

5. まとめ

離散データを補間法によって連続データとすることは数値解析においても重要である。本研究では宇宙プラズマ分野の電子衝突による水分子イオン化反応に着目した。本研究の目的は、実験を中心として得られた水分子イオン化衝突断面積の離散データに多項式補間を適用し、それらのデータの差を誤差として評価することであった。多項式補間は2次から9次まで調査した。得られた結果は以下の通りである。

- ・次数が上がるほど誤差は小さくなった。
- ・全エネルギーにおける9次の多項式と離散データとの誤差は 2.16×10^{-18} [cm²]であった。
- ・電子エネルギー (100eV以下) における9次の多項式と離散データとの誤差は 5.91×10^{-19}

[cm²]であった。

- ・電子エネルギー (100eV以上) における9次の多項式と離散データとの誤差は 3.95×10^{-19} [cm²]であった。
- ・イオン化衝突断面積のピーク (100eV) を中心に分割した方が誤差は小さくなった。
- ・シミュレーションなどの計算機資源を節約したい場合は2次の多項式補間でも十分であることがわかった。

宇宙プラズマ中における化学反応はイオン化衝突反応以外にも弾性衝突、さらに電子エネルギーが低くなれば回転遷移、振動遷移など多くの化学反応が発生する。これらの衝突断面積の形状は反応ごとに異なるため、それぞれ反応過程に応じた補間法を検討していく必要がある。さらに本研究で着目した水分子以外の中性粒子に対する同様の検討も必要であると考えられる。

参考文献

- 1) Itikawa, Y., and Mason, N. Cross sections for electron collisions with water molecules. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 2005, Vol. 34, No. 1, <https://doi.org/10.1063/1.1799251>

Polynomial interpolation of discrete data: application for ionization of water molecule through electron impact

TADOKORO Hiroyasu

[Abstract]

This paper is mainly concerned with error estimation for polynomial interpolation of discrete data. We focus on the application for ionization of water molecule through electron impact under space plasmas. The purpose of the present study is to estimate the difference between analytical value using polynomial interpolation and discrete experimental value (ionization cross sections based on experimental data). It is found that the error decreases with degree of polynomial. We leave the examination of other neutral species and other chemical reactions as our future study.

[Keywords]

polynomial interpolation, discrete data, numerical analysis, ionization, space plasma