# モンテカルロシミュレーションにおける<br>ルジャンドル多項式重み付サンプリング

宮崎　洋平†、鈴木　卓真†、堀江　育也†、三橋　龍一†、北守　一隆†
北海道工業大学†

## 1．はじめに

数値シミュレーションは、パーソナルコンピュータの高速化により、より複雑な問題を扱うことができるようになってきている。モンテカルロシミュレーションは、乱数を用いてシミュレーションを行う技法である。結果の分布をサンプルする場合には、サンプル区間を任意の区間に分割し各区間でサンプル個数をカウントすることにより度数分布が得られる。詳細な分布を求めるためには、分割数を増やして、区間幅を小さくし、サンプル個数を増やさなければならない。分布の連続性を考慮するため区間を設けずに、ルジャンドル多項式を用いた重み付けを行いサンプルすることで、統計変動を減ずるためのルジャンドル多項式の次数に応じた接線の傾きや凹凸の情報が得られる。本稿ではルジャンドル多項式による重み付けの方法とメッシュサンプリング（度数分布）と比較した結果について述べる。

## 2．モンテカルロシミュレーション

モンテカルロ法とは、乱数を使った実験によって数学的な問題の近似的な数値解を得る方法である。境界条件の取り扱いに優れており数値計算的に安定した結果が得られる。モンテカルロ法は、一般に多次元の定積分を計算したり、複雑な系の動作シミュレーションなどに広く利用されている。半導体薄膜製造におけるプラズマ・プロセスの分野においてモンテカルロ法が使われている[1],[2]。粒子モデルでは、個々の粒子の運動方程式を解き乱数により衝突判定を行う。他の流体モデルシミュレーション技法と比較し、物理現象を直接扱うことが可能となり、仮定を少なくし解析できる特徴がある。しかし統計変動による解の信頼性に対する問題が生ずる。

Legendre polynomial weighted sampling for Monte Carlo simulations
†Yohei Miyazaki ,Takuma Suzuki , Ikuya Horie ,Ryuichi Mitsuhashi and Kazutaka Kitamori
†Hokkaido Institute of Technology

## 3．ルジャンドル多項式重み付サンプリング

ルジャンドル多項式重み付サンプリング（Legendre polynomial weighted sampling：以下 LPWS）は分布関数に対しルジャンドル多項式による重み付けを行いサンプルすることで、分布関数のルジャンドル展開時の係数に対応する接線の傾きや凹凸の情報を得ることができる。

ルジャンドル多項式 $P_k(x)$ は式(1)に示す漸化式で表される。

$$(x+1)P_{k+1}(x)-(2k+1)xP_k(x)+kP_{k-1}(x)=0$$
$$P_0(x)=1,\, P_1(x)=x \tag{1}$$

分布関数 $f(x)$ はルジャンドル多項式により式(2)のように展開される。

$$f(x)=A_0P_0(x)+A_1P_1(x)+A_2P_2(x)+\cdots \tag{2}$$

ルジャンドル多項式の係数 $A_k$ は直交性により式(3)に示される。

$$A_k=\frac{2k+1}{2}\int_{-1}^{1}f(x)P_k(x)dx \tag{3}$$

サンプルする位置 $x_i$ をルジャンドル多項式 $P_k(x_i)$ の重みで次数 $k$ ごとにサンプル個数 $n$ 回の足し合わせにより式(3)の評価となる。

$$A_k=\frac{2k+1}{2}\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=0}^{n}P_k(x_i) \tag{4}$$

## 4．結果と考察

モンテカルロシミュレーションを行うことにより得られる分布を図 1 と仮定しサンプリングをするものとする。図 1 の分布は三つの一様乱数を用い式(5)により発生される。

$$\frac{x_1+x_2+x_3}{3} \tag{5}$$

$(x_1,x_2,x_3\cdots$ 一様乱数$)$

3 次、5 次、7 次の項まで使用した LPWS、サンプル個数 10000 個、区間数 1 における結果を図 2 に示す。以降 $n$ 次の項まで使用する LPWS のことを、$n$ 次の LPWS と呼ぶ。7 次の LPWS

を用いれば図 1 の分布を表現できる。図 1 の分布についてメッシュサンプリングと 7 次の LPWS との比較を図 3、図 4、図 5 に示す。比較のためメッシュサンプリングと LPWS の結果は規格化した。図 3 は区間数 20 のメッシュサンプリング、サンプル個数 10000 個であるがメッシュサンプリングでは分布が階段状になる。そこで図 4 に示すように区間を細分し区間数 100 のメッシュサンプリングを行った。しかし統計変動が見られ、抜けや突出する部分がある。図 5 のようにサンプル個数 1000000 個に増やすとメッシュサンプリングにおいても図 1 の分布を適切に表現する。一方 LPWS ではサンプル個数 1000 個でも統計変動が見られない分布が得られている。この結果から LPWS を使うことにより区間分割による統計変動の影響を回避し、少ないサンプル個数でもより正確な分布を得ることができる。

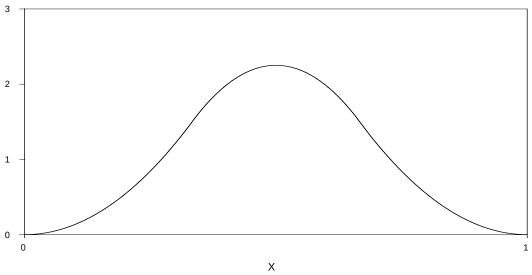


図 1.元の分布

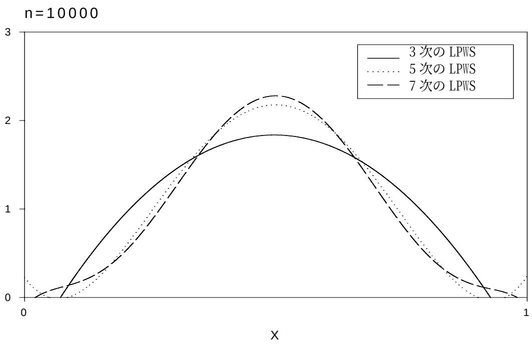


図 2.サンプル個数 10000 個　3,5,7 次の LPWS

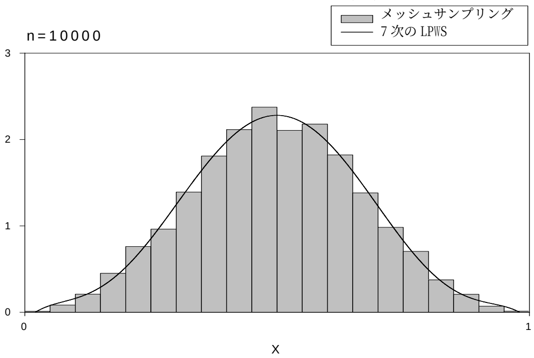


図 3.サンプル個数 10000 個　メッシュ区間数 20

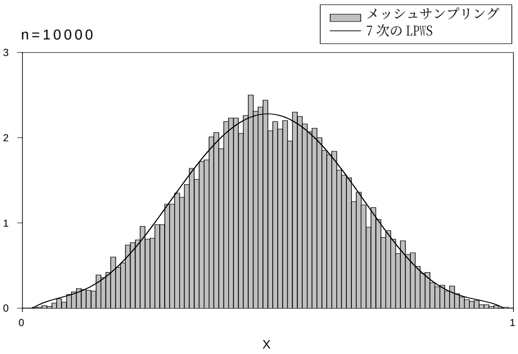


図 4. サンプル個数 10000 個　メッシュ区間数 100

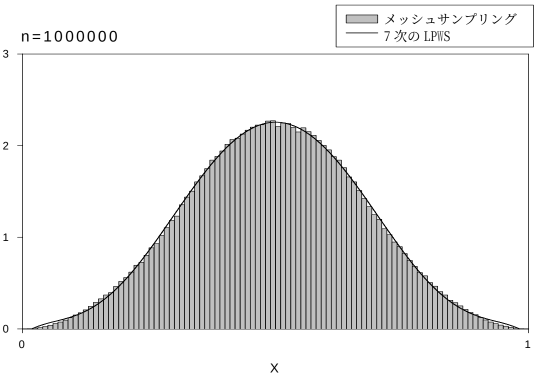


図 5.サンプル個数 1000000 個　メッシュ区間数 100

複雑な分布関数をルジャンドル展開で表現する場合、高次の項まで扱う必要があるがそれにより不適切な凹凸が発生しやすい。そのためサンプル区間を分割して LPWS を行うことにより区間内で複雑な分布にならないようにし、低次の項で分布を表現する。図 6 では全体を 3 つの区間に分割し区間ごとに 2 次の項まで使用した LPWS を行い $S_0$、$S_1$、$S_2$ の結果を得た。2 次の LPWS でも図 1 の分布を適切に表現できている。

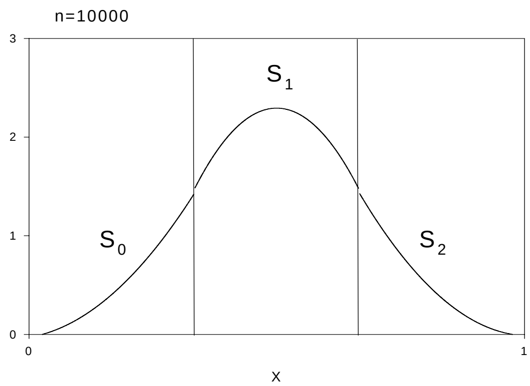


図 6. サンプル個数 10000 個　LPWS 区間数 3

## 参考文献

[1] P. L. G. Ventzek and K. Kitamori, J. Appl. Phys. 75(8) (1994) 3785
[2] S. Nakamura, P. L. G. Ventzek and K. Kitamori, J. Appl. Phys. 85 (1999) 2534