2J-1

モンテカルロシミュレーションにおける直交展開サンプリング

古川　哲也† 宮崎　洋平† 北守　一隆†
北海道工業大学†

1．はじめに

モンテカルロ法によるシミュレーションは、確率的な事象を伴う物理現象を、乱数を用いてシミュレーションを行う技法として知られている。モンテカルロシミュレーションにより表された現象をサンプリングすることにより数値化し、その現象を把握することになる。サンプリングでは、領域を分けて小区間を設けそれぞれの区間で個数をカウントすることによって度数分布を得ることができる。ルジャンドル多項式重み付きサンプリング（Legendre polynomial weighted sampling：以下LPWS）[1]は、小区間を設けずに理想的には 1 区間（領域全体）で、単純なカウントに加えルジャンドル多項式で重み付きカウントを何項か加え、分布関数をルジャンドル展開した時の係数を得ることができる。本稿ではLPWSと同様に他の直交展開サンプリングに関して言及し、チェビシェフ多項式を用いた直交展開サンプリングを行いLPWSとの比較を試みた。

2．モンテカルロシミュレーション

モンテカルロ法は、ある問題や方程式を解析的に解くことが困難な場合、乱数を用いた数値実験により現象の様子を調べたり、多次元の定積分の計算や、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[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、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。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ため、サンプリング時に注意が必要である。LPWSは統計変動を抑え信頼性の高い結果を得ることができる。

3．直交展開サンプリング

直交展開時に用いるルジャンドル多項式とチェビシェフ多項式は、有限領域を対象としている。現象から得られる分布に対し直交多項式による重み付けサンプリングをすることで、分布関数の直交展開した時の係数を得ることができる。以下にルジャンドル多項式を用いた方法を示す。

ルジャンドル多項式 $P_k(x)$ は係数 A_k の直交性により式(1)に示される。

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

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(1)の評価となる。

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

以下にチェビシェフ多項式を用いた方法を示す。

チェビシェフ多項式 $T_k(x)$ は係数 A_k の直交性により式(3)に示される。

$$A_k = \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \tag{3}$$

サンプルする位置 x_i をチェビシェフ多項式 $T_k(x_i)$ 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)の評価になる。

$$A_k = \frac{2}{\pi}\cdot\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\frac{T_k(x_i)}{\sqrt{1-x^2}} \tag{4}$$

式(2)・式(4)に示すように、ルジャンドル多項式及びチェビシェフ多項式を用い、それぞれ同等の手法により直交展開時の係数を得ることが可能である。

4．結果と考察

図 1 の分布は 3 つの乱数を用い、式(5)により発生され、①~③の 2 次関数で表現される。図１をモンテカルロシミュレーションの結果と仮定

Orthogonal expansion sampling for Monte Carlo simulations
†Tetsuya Furukawa,Yohei Miyazaki and Kazutaka Kitamori
†Hokkaido Institute of Technology

し、サンプリングを行う。

$$\frac{x_1 + x_2 + x_3}{3} \quad (5)$$

（$x_1, x_2, x_3 \ldots$一様乱数）

①$y = \frac{1}{2}x^2$

②$y = -x^2 + 3x - \frac{3}{2}$

③$y = \frac{1}{2}x^2 - 3x + \frac{9}{2}$

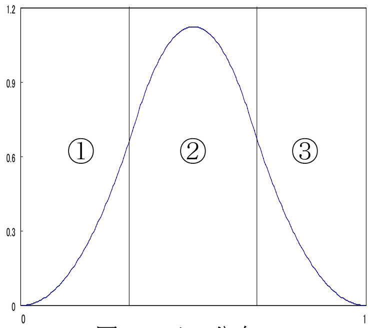

図１　元の分布

図 1 の分布についてメッシュサンプリングとチェビシェフ多項式を用いた重み付けサンプリング(Chebyshev polynomial weighted sampling : 以下 CPWS)を図 2・図 3 に示す。CPWS は直交展開時の 7 次の項まで考慮し 1 区間でのサンプリングを行うものとする。サンプル個数 10000 個の場合を図 2 に示す。区間数 100 のメッシュサンプリングでは、結果にばらつきが見られるが、CPWS では、元の分布とほぼ同様の分布が得られる。図 3 のようにサンプル個数を 100000 個に増やすとメッシュサンプリングにおいても元の分布を表現することができる。この結果から CPWS を使うことにより統計変動の影響を回避し、少ない個数でもより正確な分布を得ることができる。

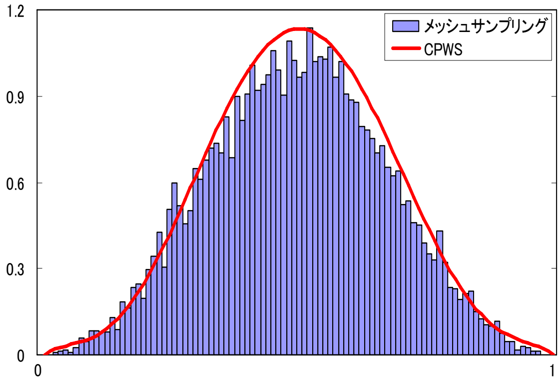

図 2　サンプル個数 10000 個　メッシュ区間 100

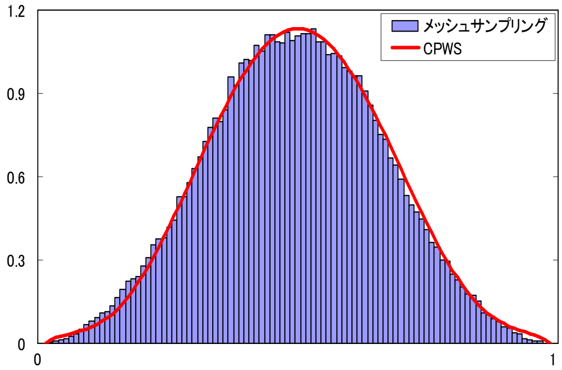

図 3　サンプル個数 100000 個　メッシュ区間 100

図 4 は CPWS と LPWS を元の分布と比較し、元の分布との差を示したものである。この 2 つを比較した結果、CPWS に比べ LPWS は元の分布との差が端部でやや大きく、この分布に関してサンプリングを行う場合は CPWS の方が有効であると考えられる。

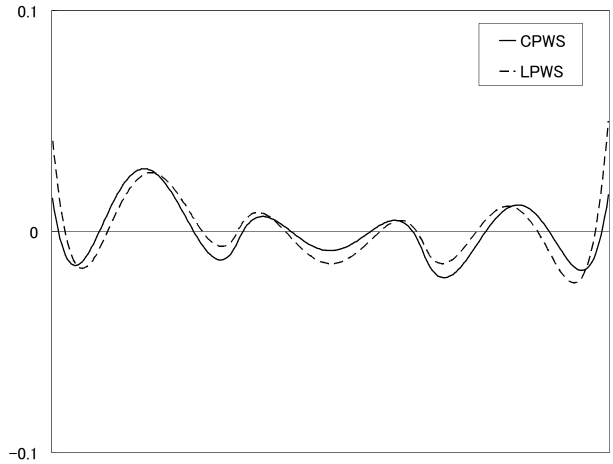

図 4　CPWS と LPWS の元の分布との差

参考文献

[1] 宮崎洋平、鈴木卓真、堀江育也、三橋龍一、北守一隆: “モンテカルロシミュレーションにおけるルジャンドル多項式重み付サンプリング” 情報処理学会第 65 回全国大会 2003 年

[2] 堀江育也、鈴木卓真、大森義行、北守一隆、丸山晃市: “LPWS 法を用いた Ar RF 平行平板プラズマのモンテカルロシミュレーション” 電気学会論文誌 A 第 123 巻 9 号，2003 年