モンテカルロ法の二，三の応用

遠　山　正　男

1.　序

この奇妙な名称を冠せられた方法とは一体どのようなものか，先ずそれから説く必要があるように思う。その昔確率論を創設した数学者の思考の根源は賭博にあったとか。“モンテカルロ”なる名から連想されるものは賭博であり，そこからこの方法の持つ内容は略々想像されよう。それは確率論を応用した問題解決の一手段なのである。モンテカルロ法を用いるには必ず乱数が使用され，統計的な考察がなされる。簡単な例を述べよう。

或る x の函数 $f(x)$ があるとし，$[a, b]$ なる領域で積分可能であるとする。

このとき

$$\int_a^b f(x)\,dx \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(1)$$

を計算しようと思う。適当な変数の変換を行えば(1)の積分は次のように変形出来るであろう。

$$\int_0^1 g(t)\,dt \qquad 且\ 0 \leqq g(t) \leqq 1 \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(2)$$

(2)式で求めようとするのは才1図で $g(t)$ の下の斜線部分の面積である。

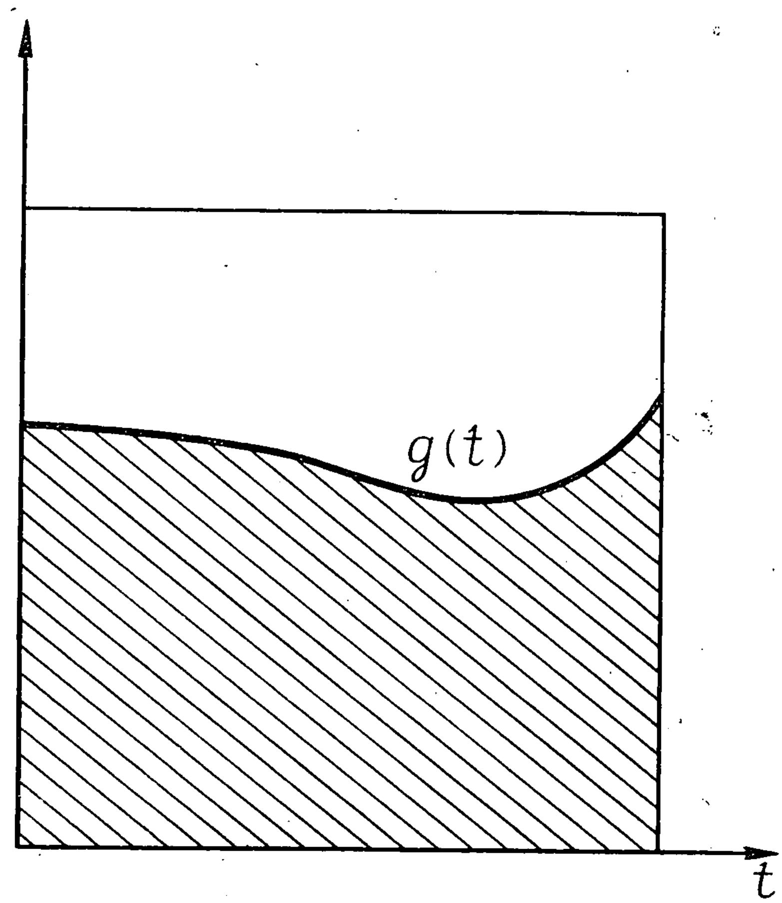
そこで乱数表を用いて2組の小数を選びそれを横坐標及縦坐標とする点Pを図中にとる。このような点Pを充分に沢山とった後，才1図の斜線を引いた部分の中にくる点の数を数えて点の総数 N との比を求めるならば

$$\frac{n}{N} = \int_0^1 g(t)\,dt \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(3)$$

となることは明らかである。このように乱数を選び出し，それを一つの演算に対応させることによって確率法則を利用して問題を解くことをモンテカルロ法と呼んでいる。このような方法は極めて応用範囲が広く，特に解析的にはとう

てい解を求めることの困難な物理学上の諸問題に対して有効な手段となっている。たゞ方法が統計的な方法によっているため多数回の繰返しが必要なため高速度の操作機械が必要である。

この操作機械に種々な指令を与えて計算を行うことになるが，その指令は乱数を使用する，しかも何組かの乱数による指令を多数回与えなければならないので従来の乱数表ではとうてい間にあわなくなってくる，そこで乱数表をどうして作るか，否それよりも乱数による指令と同じような指令を発する装置即乱数発生装置の研究が必要になってくるが，それは近頃たくみな方法が考案されたようである。然し我々がこれまで採用し，現在も採用している方法は乱数表を用いて，それによって操作指令を発するという原始的な方法に頼っている。



第 1 図

2. 2階偏微分方程式の解を求めること

物理の問題で現われる2階の偏微分方程式は3次元のものが多いが，話が簡単になるようにするため，以下においては問題を2次元で取扱うことにする。

今函数 $f(x, y)$ があって連続且適当回微分可能であるとする。

$f(x+h, y)$，$f(x-h, y)$，$f(x,y+h$，$f(x, y-h)$ 等を考えこれ等をTaylor展開すると

$$f(x+h,y)=f(x,y)+h,\ f'_x(x,y)+\frac{h^2}{2\,!}f''_{xx}(x,y)+\frac{h^3}{3\,!}f'''_{xxx}(x,y)$$
$$+\frac{h^4}{4\,!}f''''_{xxxx}(x,\ y)+\cdots\cdots\cdots\cdots(4)$$
$$f(x-h,y)=f(x,y)-h,\ f'_x(x,y)+\frac{h^2}{2\,!}f''_{xx}(x,y)-\frac{h^3}{3\,!}f'''_{xxx}(x,y)$$
$$+\frac{h^4}{4\,!}f''''_{xxxx}(x,\ y)+\cdots\cdots\cdots\cdots(4)'$$

(4), (4)′ を辺々相加えると

$$f(x+h,y)+f(x-h,y)=2f(x,y)+h^2f''_{xx}(x,y)+0(h^4) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(5)$$

$f(x,y+h)$, $f(x,y-h)$ についても (4), (4)′ と同じような展開を行い辺々相加えると

$$f(x,y+h)+f(x,y-h)=2f(x,y)+h^2f''_{yy}(x,y)+0(h^4) \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(5)'$$

(5), (5)′ から次の式をうる。

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}=\frac{1}{h^2}\Big[f(x+h,y)+f(x-h,y)+f(x,y+h)$$
$$+f(x,y-h)-4f(x,y)\Big]-0(h^2)\cdots\cdots\cdots\cdots(6)$$

従って物理学上よくでてくる方程式　$\triangle f=0$　$\cdots\cdots\cdots\cdots(7)$

$$\frac{1}{4}\triangle f=-\lambda f \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(8)$$

の左辺は(6)式を用いて定差方程式に戻して考えることができる。
但しこゝに△は 2 次元の Laplacian とする。

さてこれをモンテカルロ法に結びつけるため我々は次のようなことを考える。

今縦，横に等間隔の平行線を引いて多数の格子模様を作り，最小の単位の正方形の 1 辺を h としておく。この格子模様の格子線上を一つの格子点からその周りの格子点のどれか一つに自由に移動することのできる一つの動点Pを考える。P点は格子点の 1 つA点から出発して一歩につき h の距離だけ格子線上を移動して行くというやり方で一歩一歩動き n 歩目に丁度格子点Bに到着した

とし，このようなことの起る確率を $P_n(A|B)$ とかいておく。

以上のことを整理して箇条書にすると次のようになる。

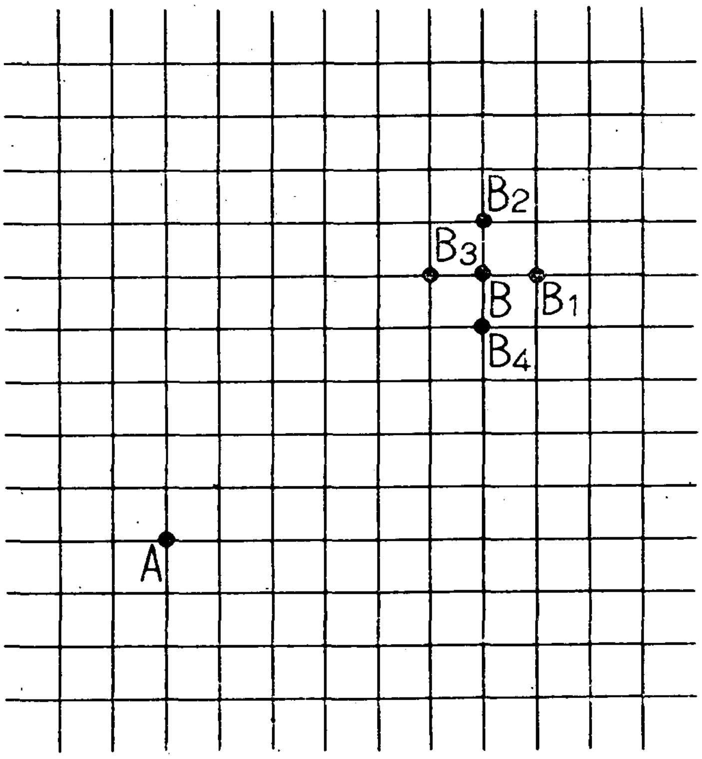
1）動点Pは1つの格子点から必ず隣接する4つの格子点の内のどれかに移り飛躍してそれ以外の点に突然移ることはない。

2）P点が或る点Cに達したとき次にその周囲の4点 C_1, C_2, C_3, C_4 のどれかに移る確率は相等しい。

この様なP点の動き方を Random-walk と呼んでおく。

そうすると

$$P_n(A|B)=\frac{1}{4}\{P_{n-1}(A|B_1)+P_{n-1}(A|B_2)+P_{n-1}(A|B_3)+P_{n-1}(A|B_4)\} \qquad \cdots\cdots\cdots\cdots(9)$$



第 2 図

こゝで $n\to\infty$ の場合を考えると

$$P(A|B)=\frac{1}{4}\{P(A|B_1)+P(A|B_2)+P(A|B_3)+P(A|B_4)\} \cdots\cdots\cdots(10)$$

直交する平行線簇の1方を x 軸に他方を y 軸に選んで，A点の坐標を（x_0,

y_0)，B点の坐標を（x, y）とすると⑽式は次のようにかきかえられる。

$$P(x_0y_0\,;x,y)=\frac{1}{4}\{P(x_0y_0\,;x+h,y)+P(x_0y_0\,;x,y+h)$$
$$+P(x_0y_0\,;x-h,y)+P(x_0y_0\,;x,y-h\}\cdots\cdots\cdots\cdots(11)$$

⑹式を参照すれば⑾の $P(x_0y_0\,;x,y)$ は⑺式を満足するから⑺と同一の境界条件を与えてやれば $P(x_0y_0\,;x,y)$ は $f(x,y)$ そのものであることがわかる。そこで具体的に条件を与えて問題のとき方をのべよう。

⑺式が

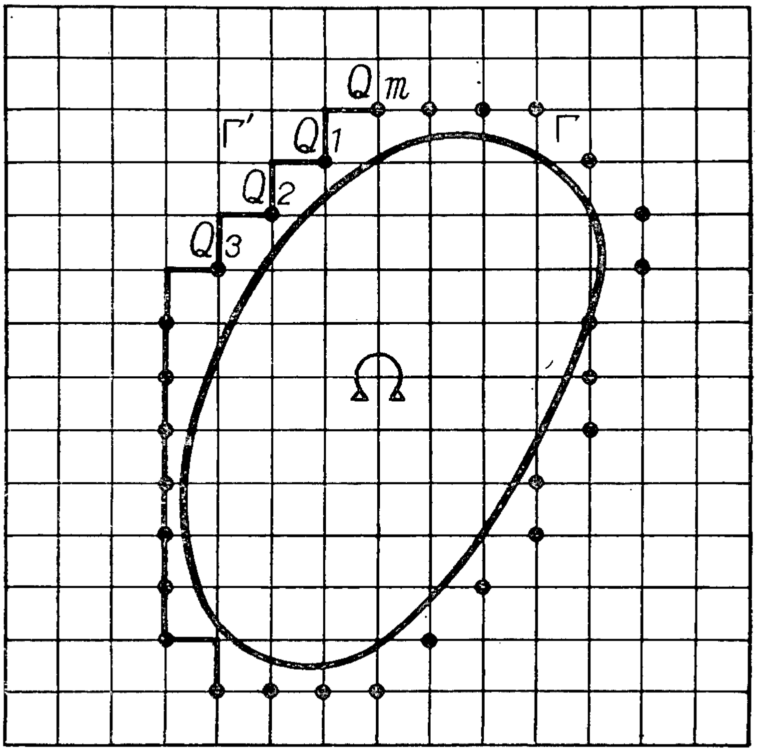
$\triangle f=0$　領域Ωにおいて

$f=\varphi$　境界 Γ 上において

φ；既知

とし，この領域Ωを等間隔の平行線で細分する（才3図)。

このとき間隔は細かい程よいが実際には操作に要する時間を考慮して分割の巾をきめる。



才　3　図

この格子点の内 Γ のすぐ外にある格子点ばかりを選んでこれを結んだ図形 Γ' でΩをおゝうようにする。

次に f の境界上の値を Γ' 上の近接する格子点に分割して与える。

即 Γ' 上の格子点 $Q_1, Q_2, Q_3, \cdots\cdots, Q_m$ に対して値 φ'_1, φ'_2, $\cdots\cdots\varphi'_m$ を附与する。そこで $f(x_0, y_0)$ を求めようとする点 A (x_0y_0) から動点Pを出発させて **random-walk** を行わせ Γ' 上の点に達したらそこで操作を打切り，再びA点か **random-walk** を繰返させる。この様な操作をN回行つて，その内動点が Q_k に達して終つた回数を n_k とすると，

$$P(A|Q_k)=\frac{n_k}{N}$$

従つて $$f(A)=\sum_{k=1}^{m}\frac{n_k}{N}\cdot\varphi_k$$

で与えられる。この方法では Γ の形状がどのようなものであつても かまわない。要するに，多数回の **random-walk** を繰返し行うのに要する時間が節約できるよう高速度で動く機械がありさえすればよい。又逆に言えば機械の作動速度から格子の分割間隔が制限を受けるわけである。

又各格子点でどちらへ進むかの指令は乱数を用いるのである。

次に(8)式のような場合は，P点の移動の際各格子点でP点が τ 秒だけ停滞するものとして考えれば前と殆んで同じようにして解を求めることができる。即ち(9)式にもどつてこれを次の様に変形する。

$$P_n\{A|B)-P_{n-1}(A|B)=\frac{1}{4}\{P_{n-1}(A|B_1)+P_{n-1}(A|B_2)+P_{n-1}(A|B_3)+P_{n-1}(A|B_4)-4P_{n-1}(A|B)\}$$

$\tau=h^2$ とおいてこの式の両辺を割ると

$$\frac{1}{\tau}\{P_n(A|B)-P_{n-1}(A|B)\}=\frac{1}{4h^2}\{P_{n-1}(A|B_1)+P_{n-1}(A|B_2)+P_{n-1}(A|B_3)+P_{n-1}(A|B_4)-4P_{n-1}(A|B)\}\cdots\cdots\cdots\cdots(12)$$

これは $$\frac{\partial P}{\partial t}=\frac{1}{4}\triangle P\qquad\cdots\cdots\cdots\cdots(13)$$

を定差方程式の形にかいたものである。(13)式を満足するPを

$P=e^{-\lambda t}\cdot\psi(x,y)$ のようにおくと明らかにこれは(8)式を満足する。

従つてこのようなP及 λ を求めることは(8)式の解を求めることになる。

尚このような固有値問題に関連して考えられるのはシユレーデインガーの波動方程式 (**Schrödinger's wave equation**) であるが，この固有函数及固有値を求める問題は常数係数の問題は抜きにして次のようにかくと

$$(-\frac{1}{4}\triangle+V)\psi=E\psi\qquad\cdots\cdots\cdots\cdots(14)$$

(8)式との違いはポテンシヤル函数Vが入っていることである。然し井戸型ポテンシヤルの場合ならば(8)式と似た形になるので解きうる。又$V=V(x,y)$の場合にはVがゆるやかに変化するものとして取扱えば略々(8)式と似た取扱いができるようであるがまだ充分には解明せられていない。

結　び

以上述べた事がらの内でも問題は全部解決されたわけではない。(8)式の問題で固有値λの値を求めようとすると，実際の操作では最も低い固有値から次々と大きい値の固有値も全部含まれたものが得られるので，この中から固有値を低い順に次々と取り出さなければならないが，これは面倒な仕事である。然し複雑な形の境界に包まれた領域での解を求める問題はモンテカルロ法による以外には正確な解は得られないであろう。この他モンテカルロ法は物質中での粒子の減速の問題，物質中に突入した素粒子の運命の追跡等応用の範囲は極めて広いと言うことができる。