



5. 乱数の変換と利用例

5. Transformation of Random Numbers and its Applications

佐竹真介, 菅野龍太郎, 本多 充¹⁾

SATAKE Shinsuke, KANNO Ryutaro and HONDA Mitsuru¹⁾

自然科学研究機構核融合科学研究所, ¹⁾量子科学技術研究開発機構

(原稿受付: 2020年5月22日)

この章では、プラズマ・核融合分野、特に、磁場によって閉じ込められた核融合プラズマの理工学におけるシミュレーションにおいて、乱数がどのように利用されているのかを紹介し、シミュレーションにおいては、一様乱数だけでなく、正規乱数など様々な乱数が目的に応じて利用されています。そこで、まずは、乱数を用いたシミュレーションを行う際に必須である、様々な乱数を生成する「乱数の変換」について説明します。次に、シミュレーションにおいて、具体的にどのように乱数を用いられているのかを解説します。乱数を用いるシミュレーション手法は、一般に、モンテカルロ法と呼ばれます。ここでは、モンテカルロ法に基づくシミュレーションについて、基礎的な例を挙げて説明します。また、近年、様々な科学技術分野において注目を集めている遺伝的アルゴリズムと、そのアルゴリズムを用いた大域的最適解を求めるシミュレーションについても説明します。

Keywords:

random number transformation method, Monte-Carlo method, Dirichlet-Poisson solver, stochastic differential equation, genetic algorithm, global optimization

5.1 乱数の変換

本講座の第2章から4章で紹介してきた疑似乱数や物理乱数は基本的に $x_i \in [0, 1]$ の実数値一様乱数でした (利用するサブルーチンによって $(0, 1)$, $[0, 1)$ ないし $(0, 1]$ の場合もありますが、ここでは厳密な区別はしません)。しかし、様々なシミュレーションに乱数を利用する際には、一様乱数以外の様々な確率密度関数に従う乱数が必要になります。本節では、そのような任意の確率密度関数に従う疑似乱数を発生させる方法を紹介し、

任意の確率密度関数に従う乱数を生成する方法としては、大きく分けて2つの代表的な方法が知られています。まず1つ目は、逆変換法 (直接法) と呼ばれる方法で、確率密度関数 f に対し累積分布関数

$$x = F(y) = \int_a^y f(t) dt$$

を考えることで、一様乱数 $\{x_i\}$ から F を通じて f に従う乱数 $\{y_i\}$ を生成するという方法です。以下、具体的に見ていきましょう。

ここでは簡単のため、確率密度関数の定義域が $[a, b]$ の連続な関数であるとし、もし下限、上限の両方あるいはいずれかが $-\infty, +\infty$ となる場合は、 $t < a, t > b$ で十分に $f(t) \approx 0$ とみなせるような下限、上限を設定しておきましょう。さて、確率密度関数の性質として、 $f(t) \geq 0$ であること、定義域全体で積分すると1になることの2つがあります。したがって、累積分布関数 $F(y)$ は、値域を $[0, 1]$

に持つ単調増加関数になります (f が不連続な場合については後述)。よって、 y は F の逆関数 F^{-1} を使って

$$y = F^{-1}(x)$$

のように表すことができます。さて、今 X が区間 $[0, 1]$ に一様分布する確率変数とすると、 $X \leq x$ となる確率は $\Pr\{X \leq x\} = x = F(y)$ です。この時、これに対応して、 $Y = F^{-1}(X) \leq y = F^{-1}(x)$ となる確率も同じく $F(y)$ です。すなわち、

$$\Pr\{F^{-1}(X) \leq y\} = \Pr\{X \leq F(y)\} = F(y)$$

が成り立ちます。上式より、区間 $[0, 1]$ の一様乱数 $\{x_i\}$ を用いて $y_i = F^{-1}(x_i)$ として与えた $\{y_i\}$ は累積分布関数 $F(y)$ に従う分布をとる、つまり確率密度関数 f に従う分布になることがわかります。

ところで、 $F^{-1}(x)$ は常に解析的に表せるわけではなく、不連続な関数である場合も考えられます。そのような場合は、生成したい乱数 $\{y_i\}$ の値域 $[a, b]$ を十分細かく分割し、数値積分を使うなどして $x_k = F(y_k)$ ($k = 0, 1, 2, \dots, N$)、ただし $x_0 = 0, x_N = 1$ 、の離散データのテーブルを用意します。そして、一様乱数ルーチンで生成した x_i の値が $x_k \leq x_i < x_{k+1}$ に入る時、例えば線形補間を用いて、

$$y_i = y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k} (x_i - x_k)$$

のようにして $y_i = F^{-1}(x_i)$ の近似値を得ることで $\{y_i\}$ を生成することが可能です。

なお、 $\{y_i\}$ が離散値しか取らない場合も、上と同様の考えから逆変換法を用いて生成できます。確率変数 y が m 通りの離散値 y_k ($k = 1, 2, \dots, m$) を取り、それぞれの発生確率が p_k であるとし (ただし $\sum_{k=1}^m p_k = 1$)。この時、区間 $[0, 1]$ 一様乱数 x_i に対して、

$$\sum_{k=0}^{n-1} p_k < x_i \leq \sum_{k=0}^n p_k$$

を満たす n を求め、この n に対して $y_i = y_n$ を採用することで、 $\{y_i\}$ を生成します。ただし、上式の総和を取る時に便宜的に $p_0 = 0$ とおきます。

もう 1 つの代表的な方法は棄却法と呼ばれるもので、一様乱数を使った試行錯誤によって得たい分布に従う乱数を発生させるものです。まず、先ほどと同様に、生成したい乱数 $\{y_i\}$ の範囲が $[a, b]$ 、その確率密度関数を f とし、さらに $f(t) < c$ であることが既知であるとし。ここで、 c は厳密な最大値である必要はなく、確実に $f(t) < c$ となるような適当な定数を設定すれば大丈夫です (近い方が乱数の生成効率はよいですが)。次に、一様乱数発生ルーチンを使って、二組の一様乱数 $\xi_j \in [a, b]$ と $\eta_j \in [0, c]$ を用意します。これに対して、 $f(\xi_j)$ と η_j の大小関係を判定します。もし $f(\xi_j) > \eta_j$ であれば $y_i = \xi_j$ を採用し、そうでなければ破棄し、次の (ξ_j, η_j) に対して同様の判定を行います。そして、必要な個数の $\{y_i\}$ が採用されるまでこの判定を繰り返せば、確率密度関数を f に従う乱数 $\{y_i\}$ が生成されます。

この他にも、 $f(t) = e^{-t}$ や正規分布の場合など、特定の関数の場合に使える乱数の変換法が色々知られています。ここでは代表的なものとして、2次元空間における正規分布 $f(x, y)$ を与える、Box-Muller 法を紹介します。

Box-Muller 法では区間 $[0, 1]$ 一様乱数を二組用意します。それらを $\{u_i, v_i\}$ とします。この手法では u_i と v_i は無相関で独立な一様乱数であることを前提としますが、第 4 章で説明したような「品質の良い」疑似乱数であれば、実際に独立な疑似乱数列を 2 系統使う必要はなく、1 系統の疑似乱数列からその奇数番目を u_i 、偶数番目を v_i 、という具合に取れば十分です。さて、平均が $(0, 0)$ 、分散共分散行列が $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ となる 2 次元正規分布関数は

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$$

で与えられますが、これを極座標系 ($r = \sqrt{x^2+y^2}$, $\theta = \tan^{-1}(y/x)$) で表現すると、

$$f(r, \theta) = \frac{r}{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}}$$

であり、 θ に関しては $[0, 2\pi)$ に一様に分布していることとなります (ここで因子 r は $(x, y) \rightarrow (r, \theta)$ の座標変換のヤコビアンから出てきます)。また、 $\int_0^\infty dr r e^{-r^2/2} = 1$ を満たすことは容易に確認できます。そこで、 r 方向に関する分布を乱数から生成する方法を考えると、累積分布関数

$$u = F(r) = \int_0^r dr' r' e^{-\frac{r'^2}{2}} = 1 - e^{-\frac{r^2}{2}}$$

の値域が $[0, 1]$ なので先ほどの逆変換法が使えそうです。しかしこのままでは逆関数が簡単に記述できないので、 $u' = 1 - u$ と置き換え、 $u' = e^{-\frac{r^2}{2}}$ とすると、その逆関数は $r = \sqrt{-2 \ln(u')}$ であることがわかります。ところで $(r, \theta) \rightarrow (x, y)$ の逆変換は

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta$$

で与えられるので、一様乱数 $\{u_i, v_i\}$ を用いて、

$$x_i = \sqrt{-2 \ln(u_i)} \cos(2\pi v_i),$$

$$y_i = \sqrt{-2 \ln(u_i)} \sin(2\pi v_i),$$

と与えると、 $\{x_i, y_i\}$ は 2 次元空間の正規分布 $f(x, y)$ に従う分布を持つ乱数となります。

他にも様々な関数形の確率分布を一様乱数から生成する方法が知られていますが、ここでは紹介しきれないので、興味のある方は文献[1, 2]などを参照してください。

(佐竹)

5.2 乱数の利用例

ここからは、磁場によって閉じ込められた核融合プラズマの理工学における乱数を用いたシミュレーション手法をいくつか紹介します。シミュレーションにおいてどのように乱数が用いられているのかを説明する前に、なぜシミュレーションで乱数を用いるのかについて考えてみます。

まずは、シミュレーションによって扱われるプラズマの諸現象が、どのような方程式により記述されているのか、その概略を見ていきましょう。議論を単純化するために、完全電離プラズマが、それぞれ $N/2$ 個の水素イオンと電子で構成されているとします。ここで、 $N \sim 10^{21}$ 程度です。このとき、荷電粒子の運動は、Newton 方程式 (および電磁場を解くために Maxwell 方程式) で記述することができます [3-5]。電場と磁場をそれぞれ \mathbf{E} および \mathbf{B} とし、 j 番目の荷電粒子の質量を m_j 、電荷を q_j とし、Newton 方程式から粒子の位置 $\mathbf{x}_j(t)$ および速度 $\mathbf{v}_j(t)$ は、

$$\dot{\mathbf{x}}_j(t) = \mathbf{v}_j(t)$$

および

$$\dot{\mathbf{v}}_j(t) = \frac{q_j}{m_j} (\mathbf{E}(t, \mathbf{x}_j(t)) + \mathbf{v}_j(t) \times \mathbf{B}(t, \mathbf{x}_j(t)))$$

で与えられます。ここで、 $j = 1, 2, 3, \dots, N$ です。この Newton 方程式と Maxwell 方程式を解くことができれば、原理的には、プラズマの温度、密度、閉じ込め時間など、磁場閉じ込め核融合炉のプラズマ性能を評価するために必要な情報を得ることができるはずですが、しかし、現実には、この方程式系を解くことは不可能です。なぜなら、全粒子間の相互作用を考慮して、 N 個すべての荷電粒子の Newton 方程式を解く必要があるからです。

そこで、プラズマの状態を近似的に記述する基礎方程式

としては、水素イオンと電子のそれぞれに対して、2体相互作用のみを考慮した6次元位相空間内の1体粒子分布関数 $f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v})$ の時間発展方程式である Boltzmann 方程式：

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + \frac{q_\alpha}{m_\alpha} (\bar{\mathbf{E}}(t, \mathbf{x}) + \mathbf{v} \times \bar{\mathbf{B}}(t, \mathbf{x})) \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \right\} f_\alpha = C_\alpha(f_\alpha)$$

が用いられます。ここで、 α は粒子種を表し、 $\bar{\mathbf{E}}$ および $\bar{\mathbf{B}}$ は外場とプラズマの集団運動が作り出す電磁場とします。 N 個の Newton 方程式から Boltzmann 方程式を導出する議論については、文献[3-5]を参照ください。上式の右辺は、2体相互作用 (Coulomb 衝突) によって起こる速度空間での拡散を表現する Landau 衝突項で、Fokker-Planck 型の式 (* 1) として記述されます[3]。さらに、左辺において、荷電粒子のジャイロ運動に対して近似的な取り扱いを行うことで、5次元位相空間の1体粒子分布関数の運動論方程式 (近似の取り方によって、ジャイロ運動論方程式、またはドリフト運動論方程式) を得ることができます[5, 6]。この運動論方程式によって、現実的にプラズマの諸現象を扱うことができるようになります。

プラズマの振る舞いは、運動論方程式によって記述されるわけですが、次に、シミュレーションにおいてなぜ乱数が用いられるのかを Landau 衝突項に注目して考えていきます。例えば、プラズマ性能を決める主要因の1つである微視的乱流輸送を扱うシミュレーションにおいては、運動論方程式の主に左辺の寄与により生じる1体粒子分布関数の微細揺動に対する数値計算の高精度化のために、分布関数そのものを5次元の連続体として扱うことが多く[7]、Landau 衝突項は、速度空間の微積分方程式として、差分スキームなどを使って数値的に解きます。このような微視的乱流シミュレーションは、理化学研究所のスーパーコンピュータ「京」などの大規模計算機を利用して100時間程度の計算時間を必要とします[8, 9]。一方、最近の研究[10]で、プラズマ性能を劣化させる不純物の輸送において、Coulomb 衝突の寄与による輸送現象 (新古典輸送) の重要性が指摘されていますが、そのような現象に対するシミュレーションにおいては、微視的乱流シミュレーションほどの速度空間分解能は要求されていないので、計算コストの低減を優先した粒子的なシミュレーション手法を用いることが多いです[11]。その場合、Landau 衝突項による拡散現象は、分布を構成するテスト粒子の速度空間におけるランダムウォークによってモデル化されます。そのような Coulomb 衝突の効果を考慮したシミュレーションにおいて、粒子のランダムウォークを具現化するため、乱数が用いられるのです。このような乱数の利用に対する簡単な例を5.2.1節で紹介します。また、このシミュレーション手法を発展させると、科学技術分野で扱われることが多い Dirichlet-Poisson 混合問題に適用することができ、そのような応用についても紹介します。

上記のような運動論方程式を解く際には、多くの場合、プラズマを閉じ込めている磁場や、プラズマの温度および密度の分布は、既知である、もしくは、初期に与えたもの

(* 1) Fokker-Planck 型とは、どのようなものかについては、5.2.1節で紹介します。

に近いと仮定しています。一方、プラズマの力学的平衡状態における磁場や、温度・密度分布そのものは、計算コストを考えて、通常、Boltzmann 方程式から導かれる3次元空間の流体方程式と Maxwell 方程式を自己無撞着に解くことで求めます[12]。この流体方程式に基づいて温度・密度分布を決定する輸送方程式が非線形偏微分方程式であるために、解を数値的に求めることが困難になる場合があります[13]。そのような場合に対処するため、5.2.2節で紹介する遺伝的アルゴリズムを用いた手法が開発されています。この場合、乱数は、物理現象のモデル化に用いるというより、非線形偏微分方程式を解くアルゴリズムにおけるツールとして使用されているわけです。

以上のように、乱数は、運動論方程式を解く際の膨大な計算コストを減じるためのモデリングにおいて利用されたり、流体方程式により記述される非線形輸送方程式を解くために利用されたりしています。

(菅野・本多)

5.2.1 拡散過程とその応用

本節では、乱数を用いた基礎的なモンテカルロシミュレーションの代表的な例として、拡散方程式の解法と Dirichlet-Poisson 混合問題への適用の2つを取り上げ、乱数がどのように利用されているのか紹介します。紹介するシミュレーション手法の数学的基盤は、確率過程論です。「確率過程」とは、時間と共に変化する確率変数 (確率的に値が定まる変数) です。この後に示すように、シミュレーションにおける乱数の役割は、数値計算上の単なるツールではなく、確率過程論に基づいて拡散現象を粒子的にモデリングしたときに導かれる数学的性質の具現化を担っています。

以下では、確率過程論における数学的結果 (定理など) を用いた手法の説明に重点を置きますので、数学用語の厳密な定義や数学的結果の導出については、文献[14-17]などを参照ください。なお、本節で扱う手法では、簡単のため、空間を1次元としますが、 n 次元空間 ($n > 1$) へ拡張できます。

● 拡散方程式の解法

プラズマ・核融合分野におけるモンテカルロシミュレーションの代表的なもの1つは、拡散方程式の解法ではないでしょうか。ここでは、荷電粒子の Coulomb 衝突や、熱拡散などのランダムネスが内在する物理現象に対する粒子的なモデリングに基づいたシミュレーション手法を紹介します。以下のような拡散方程式 (Fokker-Planck 方程式) を解くことを考えることにします。

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, x) = -\frac{\partial}{\partial x} [A(x)f(t, x)] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [D(x)f(t, x)] \quad (1)$$

ここに、時間パラメータを $t \geq 0$ 、空間を x とし、 $t, x \in \mathbf{R}$ で、 \mathbf{R} は実数とします。また、 $A(x)$ 、 $D(x) \in \mathbf{R}$ および $D(x) \geq 0$ です。式(1)を解くため、分布 f を構成する粒子の位置 $x(t)$ という量を導入し、 $x(t)$ の時間変化の式を

$dx(t)/dt = A(x(t)) + \text{ノイズ項}$, と表現しましょう. ここで, この「ノイズ項」から生じるランダムウォークの歩幅が拡散係数 $D(x)$ を与えるように設定します. 多数の粒子に対して, この式を解くと, 時刻 t におけるそれぞれの粒子の位置 $x(t)$ が求まりますので, 粒子の位置分布も得られ, それが式(1)の解です. 数学的に, もう少し厳密に言えば, 式(1)の解 $f(t, x)$ を求めるために, 式(1)に対する粒子描像の微分方程式:

$$dx(t) = A(x(t))dt + \sigma(x(t))dW(t) \quad (2)$$

に注目し, この式を解いて得られる「確率過程 $x(t)$ 」の分布が解 $f(t, x)$ であること (*2) を利用します. ここで, $D(x) = \sigma(x)\sigma(x)$ です. この確率過程 $x(t)$ は, 拡散過程とも呼ばれます. 式(2)の右辺第2項における $W(t)$ は, 数学における意味での「Brown 運動」で, Wiener 過程とも呼ばれます [14]. Wiener 過程 $W(t)$ は, ①連続で, ②離散時刻 $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{k-1} < t_k$ を適当に取って, $W(0) = 0$ として, 任意の時刻 t_k に対して $W(t_k) - W(t_{k-1})$ が平均0で分散 $(t_k - t_{k-1})$ の正規分布 $N(0, t_k - t_{k-1})$ に従い, ③また, $k \neq j$ として $W(t_k) - W(t_{k-1})$ と $W(t_j) - W(t_{j-1})$ が互いに独立となるという性質を持ちます [14]. 式(2)の「ノイズ項」において $dW(t)/dt$ のように書かない理由は, $W(t)$ が至るところ微分不可能であるためです.

式(2)のような方程式は, 確率微分方程式と呼ばれ, 日本の数学者, 伊藤 清氏によって, 1942年に数学的基礎が与えられました [18]. 式(2)は, 確率過程 $x(t)$ を求めるための「積分」を表現していて,

$$x(t) = x(0) + \int_0^t A(x(s))ds + \int_0^t \sigma(x(s))dW(s) \quad (3)$$

のように与えられます. 式(3)の右辺第3項は, 伊藤積分と呼ばれ, $\sigma(x(s))$ における時刻 s の取り方に気を付けて,

$$\int_0^t \sigma(x(s))dW(s) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{k=0}^{n-1} \sigma(x(t_k)) \{W(t_{k+1}) - W(t_k)\} \quad (4)$$

のように定義されます. 後で数値計算することを意識して, $\Delta t = t/n$ とし, $t_k = k\Delta t$, $W(t_{k+1}) = W(t_k) + \Delta W$ とします. ここで, ΔW は, 平均0で分散1の正規分布 $N(0, 1)$ に従う正規乱数 γ を用いて, $\Delta W = \gamma\sqrt{\Delta t}$ と表現できます. 確率微分方程式(2)の解の存在とその一意性のため, $A(x)$ および $\sigma(x)$ の満たすべき条件は, 適当な定数 C_0 および C_1 に対して

$$|A(x)| + |\sigma(x)| \leq C_0 \{1 + |x|\} \quad (5a)$$

および

$$|A(x) - A(y)| + |\sigma(x) - \sigma(y)| \leq C_1 |x - y| \quad (5b)$$

です. ここで, $x, y \in \mathbf{R}$ です. 詳しくは, 文献 [14, 15] など で論じられていますので, そちらを参照ください.

(*2) 証明については, 例えば, 文献 [14] の問題8.3を参照ください. この後で紹介する, 式(10)を用いる計算法との関係も説明されています.

具体的な例で, 拡散方程式を解くモンテカルロシミュレーションがどのようなものかを見ていきましょう. プラズマ中のテスト粒子 (例えば, 電子とします) が, 背景プラズマ (水素イオンとします) との Coulomb 衝突により, 速度空間をピッチ角散乱する場合を考えます. 電子の速さを v , 磁力線方向の速度を v_{\parallel} として, $\xi = v_{\parallel}/v$ で速度空間を表現することにします. ξ は, 電子のピッチ角 α (速度ベクトルと磁力線のなす角) の余弦 $\cos \alpha$ を表します. ここで, ピッチ角散乱によって速さ v は変化しないと仮定しています. ξ の取り得る値は, $-1 \leq \xi \leq 1$ です. 電子の速度空間 ξ における分布 f を与える拡散方程式は, 以下のように表現されます [19].

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \xi) = -\frac{\partial}{\partial \xi} [-\nu_{ei} \xi f] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} [\nu_{ei} \{1 - \xi^2\} f] \quad (6)$$

簡単のため, ここでは, 電子-イオン衝突周波数 ν_{ei} を定数と仮定します. 式(6)に対応する拡散過程 $\xi(t)$, つまり, テスト粒子の速度空間における位置の時間発展は, 時間ステップを Δt として, 式(2)のように与えられる確率微分方程式から自然に導かれる計算スキーム:

$$\xi(t + \Delta t) = \xi(t) - \nu_{ei} \xi(t) \Delta t + \sqrt{\nu_{ei} \{1 - \xi^2(t)\}} \Delta W \quad (7)$$

により与えることができます. ここで, $d\xi(t) \approx \xi(t + \Delta t) - \xi(t)$ としました. また, テスト粒子は, 時刻 $t = 0$ で位置 $\xi(0)$ から出発するとします. 式(7)のような計算法は, Euler-丸山スキームと呼ばれています [20, 21]. もちろん, 常微分方程式の解を求める数値計算スキームと同様に, Runge-Kutta スキーム (後で紹介します) など高次の近似法もあります [20-22]. ここでは, Euler-丸山スキームを利用することにします.

式(7)のような計算スキームは, 確率微分方程式の時間離散近似です. 時間離散近似には, 大別して, 確率微分方程式の解の経路 $\{\xi(t)\}_{t \geq 0}$ をよく近似する「強い近似」と解の平均や分散などの分布特性を近似する「弱い近似」があり [20], ΔW に対して, 強い近似では正規乱数 γ を用いて $\Delta W = \gamma\sqrt{\Delta t}$, 弱い近似では, 例えば, $\Delta W = \pm\sqrt{\Delta t}$ のように取ります. ここで, 弱い近似における“ \pm ”は, コイン投げなどで発生させた, 値が +1 または -1 の二値乱数を用いて, それぞれ確率 1/2 で与えられるとします. (弱い近似においては, ΔW に対して他の取り方もあります.) どちらの近似を採用するかは, この後に示すように, 問題ごとに適切に判断すればよいでしょう.

拡散方程式(6)を数値シミュレーションで解く場合には, Euler-丸山スキーム(7)における強い近似の採用は, あまり有効ではないことがわかっています. 以下では, このことについて説明します. 式(7)において強い近似を採用すると, 数値的に $|\xi| > 1$ となる不具合が生じます. すなわち, 数値計算において Δt は有限な値であるので, 1ステップの計算の際に発生させた正規乱数の絶対値が, ある値 γ_0 より大きくなると $|\xi| > 1$ が発生します. ここで, γ_0

は、ある時刻 t における ξ の値を $\xi(t) = \pm(1-\varepsilon)$ とし

$$\gamma_0 = \frac{(1-\theta)\varepsilon + \theta}{\sqrt{\theta\varepsilon(2-\varepsilon)}} \quad (8)$$

です。ただし、 $0 < \theta = \nu_{ei}\Delta t < 1$, $0 < \varepsilon < 2$ で、また、 $\xi = \pm(1-\varepsilon)$ の正符号は $\xi > 1$ となるケース、負符号は $\xi < -1$ となるケースで選ぶこととします。 $\xi = 1-\varepsilon$ から出発するテスト粒子の1ステップの計算で不具合 ($\xi > 1$) が発生する確率 P_{err} は、 $P_{err} = (1/2)\text{erfc}(\gamma_0/\sqrt{2})$ です。出発点を $\xi = -1+\varepsilon$ とした場合も同じです。ここに、 $\text{erfc}(x) = 1-\text{erf}(x)$ で、 $\text{erf}(x)$ は、誤差関数です。発生確率 P_{err} から、不具合は、 $|\xi| = 1$ の近傍で比較的起こりやすいことがわかります(*3)。時間ステップ Δt を小さくすることで、1ステップ毎の発生確率 P_{err} は小さくできますが、ゼロにはならないので、根本的に解決したとは言えません。数学的に $\Delta t \rightarrow 0$ の極限を取れば、 $P_{err} \rightarrow 0$ (つまり、式(7)を確率微分方程式として見たときには測度ゼロのイベント) となりますが、シミュレーションにおいてはゼロでない確率で発生するレアイベントとなります。そのため、 $|\xi| > 1$ となった場合の処理をどうするか考える必要がありますし、どのような処理でも、拡散方程式(6)には含まれていない操作なので、 $|\xi| = 1$ 近傍のテスト粒子の分布への影響が心配です。また、拡散方程式(6)の基となる Landau 衝突項のモデリングでは、小角度散乱を前提としていますので[3, 19]、有限な Δt の場合に、 $\Delta W = \gamma\sqrt{\Delta t}$ における γ の値によって散乱効果が大きくなりすぎること自体、レアイベントとは言え、モデリングの前提に反するのではないかという疑問もあります。

以上の議論から、この問題では、Euler-丸山スキームにおける強い近似の採用は、あまり有効ではないことがわかりました。そこで、文献[23]に従い、弱い近似で扱うことにし、 $\Delta W = \pm\sqrt{\Delta t}$ とし

$$\xi(t+\Delta t) = \xi(t) - \xi(t)\nu_{ei}\Delta t \pm \sqrt{\{1-\xi^2(t)\}\nu_{ei}\Delta t} \quad (9)$$

のように計算することとします。ここで、 \pm については、例えば、1ステップごとに0から1の範囲の一樣乱数を Tausworthe (トーズワース) 法で発生させ、その値が1/2未満なら負符号、1/2以上なら正符号とします。式(9)のように計算すれば、 $|\xi| > 1$ となる不具合は起こりません。時刻 $t=0$ で初期分布 $f(0, \xi)$ となるようにテスト粒子の初期位置 $\xi(0)$ を設定すれば、式(9)によって与えられる時刻 t におけるテスト粒子の位置の分布が、拡散方程式(6)の数値解 $f(t, \xi)$ になります。時間ステップ Δt を十分小さく取れば、分布の計算に関して、式(9)は、確率微分方程式として見たときの式(7)の良い近似となり、シミュレーションにおいて、分布 $f(t, \xi)$ は、初期分布 $f(0, \xi)$ に依らず、1衝突時間 $\tau_{ei} (= \nu_{ei}^{-1})$ 以降に理論通り一樣な分布に緩和します。ただし、どのような初期分布であっても、 $\xi(t)$ の数値計算における最初の1ステップ以降は、テスト粒子

(*3) 出発点を $|\xi| = 1$ とした場合は、 $|\xi| > 1$ となる不具合は発生しませんが、式(5b)を満たしていないため、解の一意性に問題があるように見えます。しかしながら、後で示す式(9)に従って、有限な時間ステップ Δt で数値的に解く際には、右辺第2項があるために、そのような問題は生じません。

は $[-1+\delta, 1-\delta]$ の範囲に存在することになります。ここで、 $\delta = \nu_{ei}\Delta t/2$ です[23]。また、有限個のテスト粒子を用いた手法なので、得られた分布に統計的な誤差は生じます。統計誤差は、テスト粒子数 N_t に対し、 $1/\sqrt{N_t}$ に比例して小さくなります。

以上が、テスト粒子の位置分布によって拡散方程式の解を与えるモンテカルロシミュレーションの紹介ですが、これとは別の計算法もあります。関数 $u(t, x)$ を $t > 0$ で、

$$u(t, x) = E^x[\Phi(x(t))] \quad (10)$$

であると定義すると、このとき、 $u(t, x)$ に対して以下の関係式が成り立つことを利用します[14]。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \mathcal{L}u \quad \text{および} \quad u(0, x) = \Phi(x) \quad (11)$$

ここで、演算子 \mathcal{L} は、式(2)に対応して、

$$\mathcal{L} = A(x)\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{2}D(x)\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (12)$$

であり、 $E^x[\Phi(x(t))]$ は、式(2)に従って時刻 $s=0$ に位置 x から出発した確率過程 $\{x(s)\}_{s \geq 0}$ の分布による $\Phi(x(t))$ の期待値で、この場合には、式(2)が与える時刻 t における x から y への遷移確率密度を $p(t, x, y)$ とし、 $\int \Phi(y)p(t, x, y)dy$ と表現することもできます。最初に紹介した計算法と式(10)を用いる計算法は、Kolmogorov の前進方程式と後退方程式の関係になっています[14]。

先ほどのピッチ角散乱の問題に適用してみましよう。解くべき方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} f(t, \xi) = -\nu_{ei}\xi \frac{\partial f}{\partial \xi} + \frac{1}{2}\nu_{ei}\{1-\xi^2\} \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} \quad (13)$$

で、対応する拡散過程は、式(7) (数値計算する際には、式(9)) です。例えば、初期分布を $f(0, \xi) = \Phi(\xi) = \{2 - \sin(\pi\xi)\}/4$ であるとする、各時刻 t における解 $f(t, \xi) = E^\xi[\Phi(\xi(t))]$ は、図1のようになります。ここで、速度空間の位置 ξ における時刻 t の分布の値 $f(t, \xi)$ は、式(9)により与えられる、時刻 $t=0$ に ξ から出発したテスト粒子の時刻 t での位置 $\xi(t)$ における $\Phi(\xi(t))$ の平均値です。当然のことながら、図1の分布は、時刻 $t=0$ でテスト粒子を初期分布 $\Phi(\xi)$ となるように配置し、式(9)によって時間発展させたテスト粒子の位置の分布と同じものになります。最初に紹介した計算法の方が、シンプルでわかりやすく感じるかもしれませんが、式(10)を用いる計算法の考え方は、より一般的な初期値境界値問題への応用に発展させることができ、次に紹介する手法とも関連しています。詳しくは、例えば、文献[15]で論じられていますので、そちらを参照ください。

● Dirichlet-Poisson 混合問題への適用

この節の後半では、科学技術分野で扱われることが多い

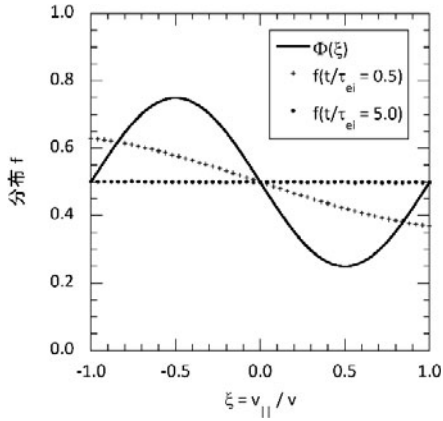


図1 ピッチ角散乱による電子分布 $f(t, \xi)$ の時間発展を式(10)に基づき計算。このシミュレーションにおいて、 $\nu_{ei}\Delta t = 10^{-3}$ と設定し、 $-1 \leq \xi \leq 1$ の範囲の格子点 (分割数50) のそれぞれに対して、 10^5 個のテスト粒子を用いて期待値 $E^\xi[\Phi(\xi(t))]$ を求めました。実線は、初期分布 $\Phi(\xi) = \{2 - \sin(\pi\xi)\}/4$ 、記号+は時刻 $t/\tau_{ei} = \nu_{ei}t = 0.5$ における分布、記号●は時刻 $t/\tau_{ei} = 5.0$ における分布です。

Dirichlet-Poisson 混合問題に対して、モンテカルロ法をいかに適用するか紹介します。次の方程式を考えます。

$$\{\mathcal{L} + \eta(x)\}u(x) = F(x) \tag{14}$$

ただし、演算子 \mathcal{L} および境界条件は、以下の通りとします。

$$\mathcal{L}u = \frac{1}{2}D(x)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + A(x)\frac{\partial u}{\partial x} \tag{15a}$$

$$\text{境界条件: } x = x_0, x_1 \text{ において, } u(x) = G(x) \tag{15b}$$

ここで、空間 x については、 $x \in [x_0, x_1]$ を仮定しています。式(15a)から、これに対応する確率微分方程式は、次のようになります[14, 15]。

$$dx(t) = \sigma(x(t))dW(t) + A(x(t))dt \tag{16}$$

ただし、 $D(x) = \sigma(x)\sigma(x)$ です。方程式(14)の解は、式(16)に従う確率過程 $x(t)$ により

$$u(x) = E^x \left[G(x(\tau)) \exp \left\{ \int_0^\tau \eta(x(s)) ds \right\} \right] - E^x \left[\int_0^\tau F(x(s)) \exp \left\{ \int_0^s \eta(x(r)) dr \right\} ds \right] \tag{17}$$

と与えられます[14, 15]。ここで、 $E^x[\cdot]$ は、式(16)に従って、時刻 $t = 0$ に位置 x から出発した確率過程 $\{x(t)\}_{t \geq 0}$ の分布による期待値を意味します。また、 τ は、式(16)に従って動くテスト粒子 (モンテカルロ法におけるサンプル粒子) それぞれに対して、区間 $[x_0, x_1]$ の外へ最初に出た時刻によって与えられます。式(17)により数値解 $u(x)$ を求めるには、すべてのテスト粒子それぞれに対する時刻 τ の値が必要となるので、式(16)の $A(x)$ の値などから、計算時間がどれくらいか推定できても、乱数を用いてシミュレーションしているために、計算時間を正確に定めることはできないという欠点があることに注意ください。

式(17)を用いる計算法では、各テスト粒子の経路 $\{x(t_k)\}_{k=1,2,3,\dots}$ と境界に最初に到達した時刻 τ が重要であ

り、Runge-Kutta スキームを採用することで、これらを与える式(16)に対する計算精度を向上させることができます。ここで、式(16)に対する Runge-Kutta スキームは、以下の通りです[21, 22]。

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{1}{2}\Delta t(A_1 + A_2) + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta t}(\sigma_1 + \sigma_2)\gamma_1 \tag{18a}$$

$$A_1 = A(x(t)) \tag{18b}$$

$$\sigma_1 = \sigma(x(t)) \tag{18c}$$

$$A_2 = A(x(t) + A_1\Delta t + \sigma_1\sqrt{\Delta t}\gamma_2) \tag{18d}$$

$$\sigma_2 = \sigma(x(t) + A_1\Delta t + \sigma_1\sqrt{\Delta t}\gamma_2) \tag{18e}$$

ただし、 γ_1 と γ_2 は、 $N(0, 1)$ に従う互いに独立な正規乱数です。これらの正規乱数は、例えば、Tausworthe 法で発生させた0から1の範囲の一様乱数を使って、5.1節で説明した Box-Muller 法で生成します。

以下の例題に適用してみましょう。

$$\left(x^3 + 8x^2 + \frac{1}{2}x\right)\frac{d^2f}{dx^2} - (4+x)\frac{df}{dx} - 2(1+x)f = 5x(1-x) - 2x \tag{19}$$

ただし、 $x \in [0, 1]$ として ($x_0 = 0, x_1 = 1$)、境界条件は $G(0) = 1$ および $G(1) = 0$ とします。式(19)の解は、 $f(x) = 1 - (x/2) - (x^2/2)$ です。シミュレーションの結果を図2に示します。ここで、図2では、得られた数値解の平滑化のため、最小二乗法を用いた多項式近似を行っています。多項式の項数の決定には、AIC (Akaike Information Criterion, 赤池情報量規準)[24]を利用しました。AICは、統計モデルの良さを評価し、良いモデルを選択するための指標です。数値的に得た解 f を微分したい場合には、そのままでは数値解の統計誤差がノイズになるので、AICなどを利用しながら数値解を平滑化することが有効です。また、得られた数値解の妥当性は、異なる乱数列を使って複数回、数値解を求めて確認します。例えば、2回計算して得られた数値解をそれぞれ f_1, f_2 として、以下のような相

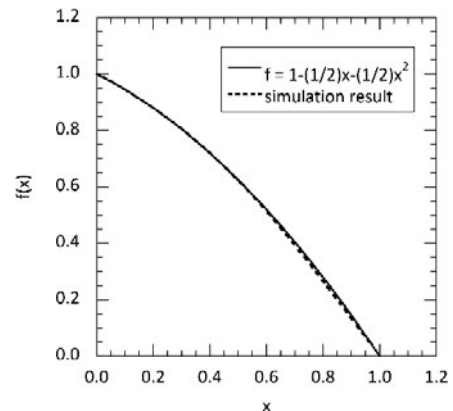


図2 方程式(19)の解析解と数値解。解析解を実線、数値解を破線で示しています[25]。数値解は、式(17)に基づき計算。区間[0, 1]における格子点 (分割数100) のそれぞれに対して 10^3 個のテスト粒子を用いて、数値解を求めました。また、 $\Delta t = 10^{-4}$ と設定。得られた数値解の相対誤差は、 $\epsilon < 1/200$ でした。

対誤差

$$\epsilon = \int_{x_0}^{x_1} |f_1 - f_2| dx / \int_{x_0}^{x_1} |f_1| dx \quad (20)$$

が十分小さいなら、数値解として妥当と言えます。

例題(19)では解がわかっていましたが、もちろん、事前に解がわからない問題を解くのが通常です。第4章で議論した、乱数の統計的品質が良いと判定される疑似乱数を利用してれば、疑似乱数の性質が計算結果に影響することは一般的には考えづらいです。それでも乱数の検定法で見抜けないような、疑似乱数の隠れた非ランダム性が計算結果に影響を与える可能性を排除したいのであれば、物理乱数を利用することで、数値解の妥当性を判断する際に、そのような影響を考えなくてよくなります。

ところで、例題(19)では、式(17)における指数関数の引数に含まれる η が負の値で、計算の実行に問題は無かったのですが、 η が正の値を取る場合には、式(17)のままでは不具合(テスト粒子によっては、指数関数部分の数値計算が破綻するなど)が発生することがあります。そのような不具合への対処の1つとして、式(14)において $\eta(x)u(x)$ を右辺に持っていき、ソース項 $F(x) - \eta(x)u(x)$ として処理すると、数値解が落ち着くまで再帰的に計算を行う必要はありますが(つまり、ソース項における $u(x)$ として、最初は適当な近似解を与え、それにより得られた近似解をまたソース項の $u(x)$ に代入して計算を繰り返すことで)、うまく克服できる場合があります[25]。例として、以下のような方程式を考えます。

$$\frac{d^2f}{dx^2} + \pi^2 f = 0 \quad (21)$$

ただし、 $x \in [0, 1]$ として、境界条件は $G(0) = 1$ および $G(1) = -1$ とします。式(21)の解析解は、 $f(x) = \cos(\pi x)$ です。計算結果を図3に示します。ここで、 $f(x)$ として最初に与えた近似解は、 $f(x) = -2x + 1$ です。シミュレーションにおけるその他の設定は、図2と同じです。図3に示したように、式(17)で $F(x) = 0$ かつ $\eta = \pi^2$ とすると計算に失

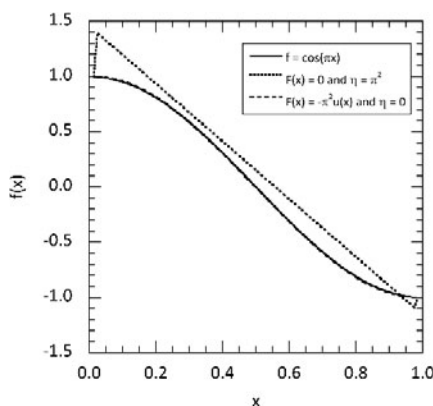


図3 方程式(21)の解析解と数値解。解析解を実線、式(17)で $F(x) = 0$ かつ $\eta = \pi^2$ とした場合は点線、式(17)で $F(x) = -\pi^2 f(x)$ かつ $\eta = 0$ とした場合の数値解(得られた数値解の相対誤差 $\epsilon = 1/100$)を破線で示しています[25]。

敗し、 $F(x) = -\pi^2 f(x)$ かつ $\eta = 0$ とすれば解析解と良く一致する数値解が得られました。もちろん、例題(19)においても、左辺第3項を右辺に持っていき、ソース項として扱って問題無く解くことができます[25]。

以上のように、本節では、確率過程論に基礎づけられたモンテカルロシミュレーションを紹介しました。プラズマ・核融合分野では、ここで紹介したもの以外に、いろいろなモンテカルロ手法が開発・利用されています。例えば、文献[26-44]などです。文献[26-31]はCoulomb衝突のモデリング、[32-38]は運動論方程式の解法、[39-42]は流体方程式の解法、[43]はプラズマ-壁相互作用研究における動的モンテカルロ法、[44]は中性子・光子輸送に関して書かれています。興味を持たれた方は、これらの文献を参照ください。

(菅野)

5.2.2 輸送方程式求解への応用

プラズマ輸送研究や統合モデリングにおいて、プラズマの巨視的な時間発展や定常状態における分布を求めるために輸送コードが広く用いられています。とりわけ、運転シナリオ開発や実験解析においては定常状態を対象とすることが多く、非定常輸送コードでプラズマの分布が変化しなくなるまで時間発展させて定常状態の分布を求めています。輸送コードは放物型偏微分方程式である1次元の輸送方程式に基づいており、通常は有限差分法や有限要素法によって時空間方向に離散化して数値的に解きます。温度分布を求めたい場合、圧力(内部エネルギー)を従属変数とした輸送方程式を解きます。拡散係数(輸送係数とも言います)がプラズマの内部状態に対して不変である場合、またはその応答が線形である場合は求解は容易です。しかし、現実のプラズマの輸送は新古典輸送や乱流輸送によって支配され、それらは温度勾配などの熱力学的力に非線形に依存しています。そのため、輸送方程式は非線形の偏微分方程式となり、解析的に一般解を求めることは困難です。数値的に解けたとしても数値的安定に求めることも困難になります。従来型解法の枠内で数値的安定に定常解を求めるアルゴリズムが提案されてきましたが[45, 46]、期待した結果が得られないこともしばしばです。

本節では、輸送方程式を解いてプラズマの定常分布を求めるという問題を、定常状態を満たす温度と温度勾配の適切な組み合わせを求める大域的最適化問題へと転換し、その解法としてメタヒューリスティックなアルゴリズムである遺伝的アルゴリズム[47, 48]を適用した例を紹介します。ここまで読まれてきて、この話が一体どう乱数と関係するのか疑問に思われたかもしれませんが、遺伝的アルゴリズムの中で乱数は重要な働きをします。以下では、まず遺伝的アルゴリズムの簡単な紹介をしたのちに、遺伝的アルゴリズムを用いた輸送方程式の求解法へと進んでいきます。

● 遺伝的アルゴリズムとは

遺伝的アルゴリズムは進化的アルゴリズムの中でも代表的なものであり、自然界における自然淘汰、遺伝、交叉、突然変異などの生命の進化過程を数値的アルゴリズムで模したのになります。遺伝的アルゴリズムでは必然的に進化

遺伝学用語が多く使われますが、あくまで数値的な最適化アルゴリズムであり、生物学の文脈で使われる概念とは必ずしも厳密に一致しませんのでその点をご留意ください。一口に遺伝的アルゴリズムと言っても実装は様々かと思いますが、以下ではPIKAIA[49,50]というFortran言語における実装を基に、遺伝的アルゴリズムがどのようにして大域的最適解を求めるのかを見ていきましょう。

最適解、すなわち解を求めるためには、当然ですが最適性の基準が必要になります。この品質の尺度を適応度と呼び、適応度を求めるための関数を適応度関数 $f(x)$ と言います。大域的最適化問題を解くとは、パラメータ空間 $x \in [0, 1]$ で $f(x)$ を最大化するパラメータ x を見つけることを言います。なお、 x は適当な規格化によって $[0, 1]$ に収まるようにしています。

まず、これから生存競争を繰り返す個体（表現型とも

言います）の集団を生成します。扱う問題にも依りますが、一般的に多くのテスト粒子数を必要とするモンテカルロ法とは異なり、個体数は典型的に100程度です。アルゴリズムの流れは以下の通りです。(1)パラメータ空間の中で個体をランダムに生成し、各個体の適応度を評価します。(2)次に、適応度に応じて現在の集団からつがいを選択し交配させ、次世代の集団を作ります。(3)次世代の集団を現世代と置き換え、(4)新しい集団の個体に対して適応度を評価します。集団の中で最適な（最大の適応度を持つ）個体が、設定した基準を満たすか設定した世代数に到達するまで、(2)-(4)の過程を繰り返します。最終世代の集団で最適な個体の持つパラメータ $\arg\left(\max_{x \in [0, 1]} f(x)\right)$ が最適解となります。

以上が遺伝的アルゴリズムの“アルゴリズム”になりますが、これだけだと乱数との関わりがはっきりしないかも

乱数茶話

5.2.1節で紹介したモンテカルロシミュレーションでは、拡散方程式を解く際に、対応する確率微分方程式に従うテスト粒子の運動を利用しました。例えば、拡散方程式(13)に対応した確率微分方程式（の計算スキーム）として式(7)（数値計算する際には、式(9)）を用いましたが、これ以外にも式(13)に対応する確率微分方程式はあるのでしょうか？このことに関して、文献[14]に興味深い問いが載っています。それは、「いつ伊藤過程は拡散過程となるか？」です。伊藤過程とは、次のように与えられる確率過程 $y(t)$ を指します。より正確な定義は、文献[14]を参照ください。

$$dy(t) = \alpha(t)dt + \beta(t)dW(t)$$

ただし、 $\alpha(t)$ および $\beta(t)$ も確率過程で、任意の時刻 $t \geq 0$ に対して確率1で以下を満たすとします。

$$\int_0^t |\alpha(s)| ds < \infty \text{ および } \int_0^t \beta(s)^2 ds < \infty$$

文献[14]による「問い」への答えですが、以下の拡散過程 $x(t)$

$$dx(t) = A(x(t))dt + \sigma(x(t))dW(t)$$

と $y(t)$ との間に、 $\alpha(t)$ に対する次の条件付き期待値について

$$E^x[\alpha(t) | \mathcal{F}_t] = A(y^x(t))$$

かつ、 $\beta(t)$ について

$$\beta(t)\beta(t) = \sigma(y^x(t))\sigma(y^x(t))$$

が、ほとんどすべての時刻 t 、およびほとんどすべてのテスト粒子に対して成立する場合、 $x(t)$ と $y(t)$ は、法則の意味で一致する（つまり同じ分布を持つ）というのです。ここで、 $y^x(t)$ は $t=0$ で位置 x から出発した $y(t)$ を意味し、 \mathcal{F}_t は $\{y(s); s \leq t\}$ の生成する σ -加法族[14]

です。

試しに、拡散方程式(13)で考えてみましょう。 $\mu(t)$ を $-1/10$ から $+1/10$ の範囲の一様乱数として、次のように式(9)に加えてみます。

$$\xi(t + \Delta t) = \xi(t) - \{\xi(t) + \mu(t)\} \nu_{ei} \Delta t \pm \sqrt{1 - \xi^2(t)} \nu_{ei} \Delta t$$

この式を用いて、 $E^\xi[\Phi(\xi(t))]$ を計算すると、例えば、 $t/\tau_{ei} = 0.5$ における分布は、図4のように図1と同じ結果になります。 $|\xi| > 1$ とならない範囲で、 $|\mu(t)|$ の最大値を変えてみても、結果は変わりません。つまり、このような一様なノイズは、分布 $f(t, \xi) = E^\xi[\Phi(\xi(t))]$ に影響しません。

ここで紹介した文献[14]の数学的結果は、微視的運動から巨視的スケールの分布に従う方程式へのモデリングにとって、重要な意味を持つように思えるのですが、いかがでしょうか。

(菅野)

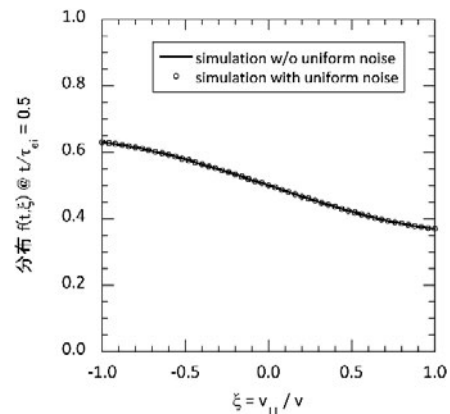


図4 ピッチ角散乱によって時間発展する電子分布に対する一様なノイズの影響。実線は図1の時刻 $t/\tau_{ei} = 0.5$ における分布、記号○は一様なノイズを加えた場合の時刻 $t/\tau_{ei} = 0.5$ における分布。一様乱数 $\mu(t)$ は、Tausworthe法を利用して、 $-1/10$ から $+1/10$ の範囲で与えました。初期分布、各パラメータの設定値、およびテスト粒子の総数は、図1と同じです。

しれません。そのため、乱数との関連という観点から各段階をもう少し詳細に見ていきたいと思えます。

まず、個体とは何かについて説明します。個体とは遺伝子の集合からなるものとして捉えられており、最適化したいパラメータの組の数だけ遺伝子の組があると思ってください。例えば、2次元空間 (x, y) (ここで、 $x, y \in [0, 1]$) において $(0.5, 0.5)$ に最も近い $x \equiv (x, y)$ を求めるとします。念のためですが、理想的な答えは $(0.5, 0.5)$ なので自明です！あくまで遺伝的アルゴリズムの概念をわかりやすく伝えるために設けた問題です。適応度関数の設定方法は色々ありますが、ユークリッド距離の二乗の逆数 $f(x) = [(x-0.5)^2 + (y-0.5)^2]^{-1}$ とすれば良いことがわかります。 x, y は何桁かの数字 (遺伝子) からなっており、今回の例では座標値になる訳ですが、その初期の座標値を $[0, 1]$ の一様乱数から生成し、個体数分だけ繰り返します。これが(1)で行っている作業です。オリジナルの PIKAIA では線形合同法による乱数を用いていますが、筆者はそれを Mersenne-Twister (メルセンヌ-ツイスター) に換装して使用しています。

(2)の過程は遺伝的アルゴリズムの中でも最も重要なものです。個体の集団の中から、1組のつがい、すなわち父と母を選択します。父と母をランダムに選択するのではなく、適応度に応じて選ばれる確率を変える必要があります。そのために、まずルーレット選択と呼ばれるサンプリング手法を用いると、どうなるか見てみましょう。その方法ではまず、全個体の適応度の和 F と、個体番号が若い方から順に定義される適応度の累積分布を作成し準備しておきます。そして、一様乱数 $R \in [0, F]$ を生成すると、その乱数 R は必ず離散的な累積分布のどこかの区間に対応する値を取り、その区間を示すインデックス値から特定の個体番号と一対一対応が付けられるために、乱数によって個体を選択できます。ルーレット盤は個体数で分割されており、各個体の適応度の大きさによって区間の面積が決定されているイメージです (イメージしにくい方は[48]の図2.5をご覧ください)。これで問題は全くないように思いますが、実は適応度の大きさに応じて決めてしまうと、多くの問題が生じることが知られています。わかりやすい例を挙げると、1つか2つの個体が極端に高い適応度を持っておりその他がそうでない場合、このサンプリング方式ではほぼ常に適応度の高い同じ個体を選ばれてしまうことになり、最適化過程にとって重要な集団の多様性が失われてしまいます。それを避けるために、ランキング選択と呼ばれる方法が使われます。適応度の高い順に個体を並べるのですが、個体の選ばれやすさはランク (順位) の高さで決まり、適応度の値そのものでは決まらない、という方式です。つまり個体間での選択確率の差が同じである、というわけです。ランクを横軸に取り、相対適応度を縦軸にとると、右肩下がりの直線を引くことができますが、この勾配を制御することによって、淘汰圧の強さを調整することができます。

このようにして選ばれたつがいの父を $P1: (x, y) = (0.1234, 0.5678)$, 母を $P2: (x, y) = (0.8642, 0.7531)$

としましょう。座標値は有効数字4桁で取ったので、合わせて8つの遺伝子を持った個体から各々の染色体 $SP1: 12345678$, $SP2: 86427531$ を作ります。このエンコード過程は自明かと思えます。次に、一点交叉と呼ばれる演算を行います。両親の染色体のつがいに対して乱数によって決まった位置で染色体を切断し、付け替えます。この場合ですと、一様整数乱数 $K \in [1, 8]$ を生成し、例えば4が選ばれたとすると、3番目と4番目の遺伝子座の間で組み替えが起こるため、染色体はそれぞれ $SO1: 12327531$, $SO2: 86445678$ となります。PIKAIAでは世代ごとに集団の数は増減しないため、2人の親から2人の子が生まれることとなります。つまり、これらは子の染色体となります。更に、ある変異率 (通常は0.005程度です) で突然変異を起こします。染色体を構成する遺伝子ごとに生成した一様乱数 $R \in [0, 1]$ が変異率を下回った場合に、その遺伝子を一様整数乱数 $K \in [0, 9]$ で置き換えます。これを一様な一点突然変異と呼びます。突然変異のさせ方は他にも色々ありますが、詳細な説明は割愛します。ここでは $SO1$ に対しては6番目の遺伝子が9に、 $SO2$ に対しては2番目の遺伝子が3になったとしましょう。これをデコードすると、子はそれぞれ $O1: (0.1232, 0.7931)$, $O2: (0.8344, 0.5678)$ となります。こうして生まれた子世代は一旦プールされ、親世代と同数になるまで上記の過程が繰り返されます。なお、ランキング選択方式からわかるとおり、適応度の高い個体は1つの世代で何度でも親に選ばれることがあります。

子世代に個体が出揃うと、(3)の世代交代を行います。最も簡単に広く使われている方法は、集団を完全に子世代の集団で置き換えてしまう、というものです。但し、エリート選択という手法を使う場合は、親世代で最も適応度が高い個体は無条件で子世代へと引き渡されます。交叉や突然変異によってその世代での最適個体を壊してしまうのを避けることで、収束を悪くしないための工夫です。子世代からは1個体がランダムに排除されてしまいますが、仮に選ばれた子世代の個体が親世代の最適個体よりも適応度が高い場合は、親世代の最適個体は次世代に引き継がれません。

最後に、こうして作られた子世代の適応度を評価するのが(4)です。 $P1, P2, O1, O2$ の適応度を評価すると、 $O2$ が最も大きな値を示していることがわかります。これは $O2$ が $(0.5, 0.5)$ に最も近い個体であることを示しており、この例では、1世代を経てより“優秀”な子どもが生まれたこととなります。参考までに、このシミュレーションの結果を図5に示します。図5では各世代において最適個体の持つ座標値が世代ごとに示されています。既に第1世代から正解にかなり近く、10世代程度で正解と見なして申し分ない精度に到達し、第25世代で完全に正解に到達します。なお、適応度関数 f の定義から、 $(0.5, 0.5)$ における適応度は無限大になりますが、数値的に工夫することで無限大を避けるようにしています。ただし、遺伝的アルゴリズムはメタヒューリスティックアルゴリズムであるため、正解に必ず到達する保証はないことに注意してください。この例では $(0.5, 0.5)$ にたどり着きましたが、選択する乱数

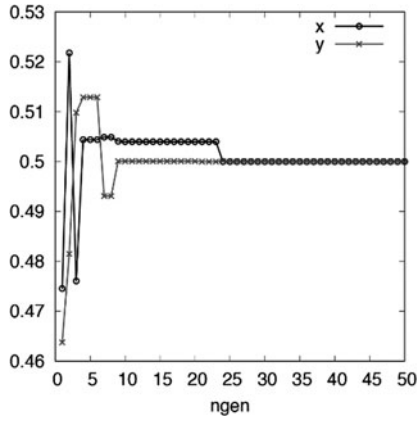


図5 各世代における最適個体の持つ遺伝子 (x, y座標). 最初の10世代でほぼ正解の(0.5, 0.5)に収斂し, 25世代で完全に正解と一致します.

シードによっては0.4999などで止まってしまうこともあります。しかし、それでも十分正解と見なせるでしょう。ここまで簡単に遺伝的アルゴリズムの実装を見てきましたが、数多の過程において一様乱数が用いられていることがわかるかと思います。

●大域的最適化手法を用いた輸送方程式の求解

遺伝的アルゴリズムは大域的最適化手法の一つとして位置付けられており、多峰性を持ったパラメータ空間において最適解(最大値とします)を見つけることを得意としています。多峰性の例として、 $x \in [0, 1]$ における正規分布の重ね合わせからなる関数 $y(x) = \sum_{j=1}^2 A_j \exp[-(x-x_j)^2/\sigma_j^2]$ を考え、その最大値を見つけてみましょう。ここで、 $[A_1, x_1, \sigma_1, A_2, x_2, \sigma_2] = [0.9, 0.2, 0.025, 0.3, 0.7, 0.15]$ とします。最大値0.9は $x = 0.2$ を中心とする急峻な正規分布の頂点に位置する一方、幅広い裾野を持った正規分布に極大値があります。Newton法などに代表される局所最適化手法では、極大値ではなく最大値を見つけられるかどうかはひとえに初期値の選択に掛かってきますが、問題を解く前に最大値にたどり着く適切な初期値を知っていることは稀です。局所勾配に依存する最適化手法では、 $x \geq 0.282$ に初期値を取ると極大値0.3へと向かってしまい真の最大値0.9を見つけることはできません。言い換えると、ランダムに初期値を選んだ場合、7割強の確率で最大値を求められないこととなります。大域的最適化手法は局所最適化手法と比べ一般に計算コストが掛かる一方で、アルゴリズムにも依りますが局所最適化手法よりも広くパラメータ空間を俯瞰する特徴があります。極大値近傍に適応度の高い個体が集まっている状況下でも、突然変異などで $x = 0.2$ 近傍に個体が生じるとそちらの方が高い適応度を持つため、局所最適解から抜け出して最大値を見つけ出せます。

遺伝的アルゴリズムは最大値を見つける際に微分値を必要としません。そのため、微分を高精度に評価することが困難であったり、僅かな微分値の違いが結果を大きく左右してしまったりするような問題であっても、安定に解を見つけることができます。そのような問題の例としては、分布の勾配に強い依存性を持つ輸送モデルを用いる場合が挙げられます。分布の勾配という微分の精度が、輸送モデル

が算出する輸送係数に大きな影響を与えてしまいます。そこで微分に依らない解法である遺伝的アルゴリズムに着目し、大域的最適化手法を用いた定常輸送方程式の解法の開発に取り組みました[18]。

以下では、簡単のため1粒子種のみを考えます。定常の輸送方程式は

$$0 = -\frac{1}{V'} \frac{\partial}{\partial \rho} V' \left(-n \langle |\nabla \rho|^2 \rangle \chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \right) + S \tag{22}$$

と書けます。 ρ は規格化小半径, V は体積, ' は ρ 微分, n は密度, χ は拡散係数, T は温度, S は加熱パワーなどに対応するソース項になります。 $\langle |\nabla \rho|^2 \rangle$ は平衡計算で求められるメトリックであり、ここでは既知であるとします。 $\chi = \chi(T, T', n, n', \dots)$ は一般に密度, 温度やそれらの勾配などに非線形に依存しているため、式(22)は非線形の偏微分方程式となります。 V, n, S が既知である場合に、この方程式を満たす T を求める、というのがここで考える問題です。ここで、式(22)の括弧内は熱流束 Q であり、

$$Q(\rho) = -n \langle |\nabla \rho|^2 \rangle \chi \frac{\partial T}{\partial \rho} \tag{23}$$

を使って

$$0 = -\frac{\partial}{\partial V} (V'Q) + S \tag{24}$$

と書き換えられます。式(24)を空間積分すると、

$$V'Q(\rho) = \int_0^\rho V'S d\rho \equiv P(\rho) \tag{25}$$

となります。ある磁気面を横切って外側に流れ出る熱流束は、その磁気面より内側に吸収されたパワーと等しいことを表しています。式(23)の温度 T を変化させることで式(25)を満たすように Q を変えることから、 P/V' を目標熱流束と呼びます。

では、どのように式(25)を満たす T を見つければ良いのでしょうか。通常的手法ですと、空間方向にメッシュを作成し、有限差分法や有限要素法で空間離散化し、非線形項である χ を線形化して T に対する連立一次方程式を作り、それを直接法ないし間接法で解き、得られた解(温度)を再び χ に代入して連立一次方程式を解き直し、その作業を温度が収束するまで繰り返します[51]。ここではそのような一般的な方法を探らずに解 T を求める方法を考えてみましょう。温度勾配を規格化した $1/L_T \equiv (-\partial T/\partial \rho)/T$ で式(23)を表記すると、

$$Q(\rho) = -n \langle |\nabla \rho|^2 \rangle \chi(T, 1/L_T) T \frac{1}{L_T} = \frac{P}{V'} \tag{26}$$

となります。最後の等式は式(25)から来ました。式(26)では χ の $T, 1/L_T$ の依存性を陽に書きました。温度と温度勾配には物理的に現実的な定義域がありますから、そのパラメータ領域内で各 ρ において式(26)を満たす $(T, 1/L_T)$ の組み合わせを見つけることができれば、それが式(22)の解と

なります。この手法だと、直接温度の微分値である $1/L_T$ を探しているため、微分方程式の解を求めるのに微分が不要であることがわかんと思います。

解の組み合わせを求める手法ですが、極端なことを言えば、そのパラメータ領域内を極度に細かく分割して全ての組み合わせに対して当てはめを行えば、どこかで解は見つかるでしょう。現実的にはそこまで細かな分割はできませんので、計算精度と掛かる計算時間を秤にかけて妥当な刻み幅を決めざるを得ません。非線形性の強い輸送モデルを用いる場合、僅かな勾配の差が大きな熱流束の差を生んでしまうため、先程まで極端に細かくないにしてもやはり十分細かな分割が必要になります。規格化温度勾配の定義域を $[0, 10]$ として、刻み幅を 0.01 とかなり粗く取ったとしても、1000メッシュ必要になります。温度に対しても同じく1000メッシュ用意すると、組み合わせは 10^6 にも上ります。これを、空間分割数分繰り返さなくてはいけないため、膨大な試行が必要になります。さらに、この組み合わせの中には解として全くあり得そうに無い組み合わせも存在しているため、無駄の多い手法であることがわかります。そのような無駄を省くために、この解の組み合わせを見つけるアルゴリズムとして大域的最適化手法である遺伝的アルゴリズムを用いるのです。遺伝的アルゴリズムでは、最初こそモンテカル的にランダムに値を生成しますが、そこからはより解に近い（適応度の高い）組み合わせを持った個体がより生き残るため、急速に最適解へと収斂していきます。

熱流束を求める時は、“正解”である目標熱流束 P/V' が事前にわかっていたため、 Q を目標熱流束に合わせる事ができたのですが、正解がわかっていない温度 T はどのように求めたら良いでしょうか。一つの考え方は、 $1/L_T$ の値が定まったのだとしたら、それは温度に対する常微分方程式になるため、境界の温度さえわかれば後は全て積分で求められる、というものです。しかし、この手法は上手くいかないことがあることがわかっており [18]、別の手法を考える必要があります。式(23)で $V'Q = P$ であることに留意して外側境界から積分してみましょう。すると、

$$T(\rho) = T(\rho_b) + \int_{\rho}^{\rho_b} \frac{P}{n(|\nabla\rho|^2) \chi(T, 1/L_T) V'} d\rho \quad (27)$$

という関係が得られます。 $T(\rho_b)$ は計算領域の外側境界 $\rho = \rho_b$ での固定された温度であり、Dirichlet 条件に相当するものです。式(27)は非線形の積分方程式であり、被積分関数中の χ に陰に含まれる T (T_r とします) と左辺の T (T_l) が同一となるような T を見つけなければなりません。本来このような解を見つけることは難しいのですが、大域的最適化手法によって比較的容易に見つけ出すことができます。ところで、式(27)は $1/L_T$ にも陰に依存しているため、 $1/L_T$ も適切に定まらなければ収束解にはたどり着きません。つまり、式(26)も同時に満たさなくてはなりません。各個体の持つ $(T, 1/L_T)$ に対して式(26)および(27)を計算し、得られた Q と T に対して

$$f_1 = \left[\frac{P - V'Q}{P} \right]^2, \quad f_2 = \left[\frac{T_l - T_r}{T_l} \right]^2 \quad (28)$$

を評価し、最終的に遺伝的アルゴリズムによって

$$f = [\max(f_1, f_2)]^{-1} \quad (29)$$

を最大化する個体を見つけます。その個体の持つ $(T, 1/L_T)$ が最終的な式(22)の解となる訳です。 f_2 の意味はわかりにくいかもしれませんが、 f_2 が小さいとはすなわち、ある温度 T_r を入力として用いて式(27)を計算した時に得られる T_l が入力の T_r とがほぼ同じである、ということの意味をしています。そのような T は式(27)を満たしている、ということがわかるかと思ひます。

● 計算例

上記のアルゴリズムで温度分布を解いた計算例の一つを示します。計算は、上記のアルゴリズムに基づく定常輸送コード GOTRESS で行いました。加熱分布や平衡は JT-60U のとある放電実験のデータから持ってきました。輸送モデルには CDBM [52] を用い、径方向 50 点で 1 粒子種（電子に相当します）の温度分布の計算を PC クラスタで実行したところ、約 2.77 秒で計算を終えました。平均すると、各径方向点当たり 212 世代で収束解が得られていることとなります。なお、世代ごとの個体数は 100 であり、CDBM の評価を行った回数総数は 106 万 6 千回となります。図 6 が示すとおり、各径方向位置において目標熱流束に対応する加熱パワー累積分布 P （実線）と輸送熱流束に対応するパワー累積分布 $V'Q$ （丸印）が一致していることがわかります。これは、式(26)を満たしていることを示しています。その時の規格化温度勾配分布は図 7 に、温度分布は図 8 に示されています。温度分布や規格化温度勾配分布が共に滑らかに得られていることがわかるかと思ひます。この時の規格化温度勾配分布は温度勾配を何らかの微分スキームで微分したものではなく、温度分布と独立に得られたものであることを強調しておきます。また、図 8 には拡散係数分布も示されています。GOTRESS 内部では新古典熱拡散係数も計算しているため、CDBM で評価された乱流熱拡散係数との和が示されています。なお、磁気軸においては規格化温度勾配、つまり輸送熱流束は 0 であることが自明であ

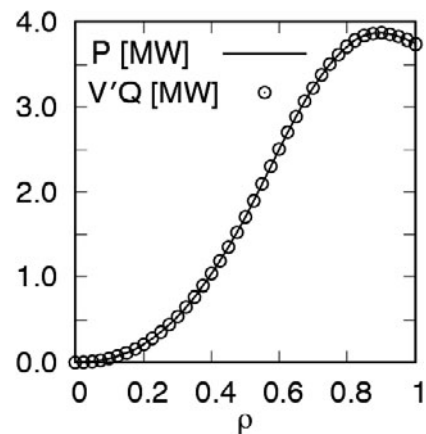


図 6 目標熱流束に対応する加熱パワー累積分布 P と輸送熱流束に対応するパワー累積分布 $V'Q$ 。

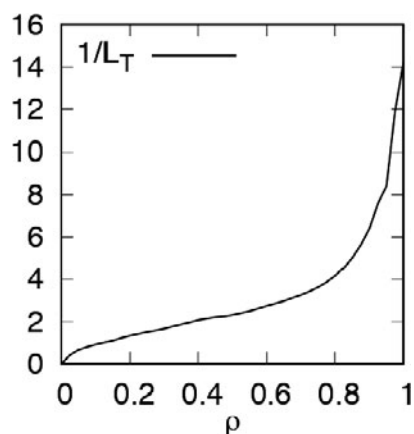


図7 規格化温度勾配 $1/L_T$ の定常解。

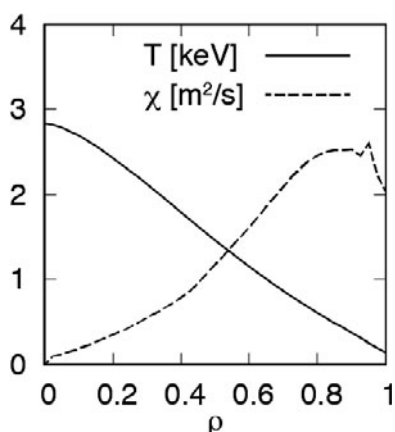


図8 温度 T の定常解とその時の拡散係数 χ 。拡散係数は CDBM で評価された乱流熱拡散係数に新古典熱拡散係数が重畳されたものです。磁気軸での拡散係数は 0 としています。

るため、磁気軸では計算しておらず、磁気軸での温度は温度勾配零の条件から算出しています。そのため磁気軸での拡散係数を算出する必要はなく、0 と置いています。

本節では、一見およそ繋がりがなさそうな遺伝的アルゴリズムと偏微分方程式の求解が、解法の工夫によって結びつけられ、輸送方程式を解くという実際の問題へと適用できることをご紹介いたしました。輸送コードとしての GOTRESS は複数粒子種を扱えたり並列計算が行えたりするなど多くの特徴を備えています。詳細は[53]を参考にしてください。

(本多)

謝辞

5.2.1節におけるシミュレーションで利用した Tausworthe 法に基づく疑似乱数発生プログラムを提供いただいた、高丸尚教氏(中部大学 工学部 教授)に感謝いたします。また、5.2.1節に対して、松山顕之氏(量子科学技術研究開発機構 六ヶ所核融合研究所 主幹研究員)より、貴重なコメントをいただきました。ここに感謝申し上げます。

参考文献

- [1] 津田孝夫: モンテカルロ法とシミュレーション (三訂版) (培風館, 1995).
- [2] 伏見正則, 逆瀬川浩孝 (監訳): モンテカルロ法ハンドブック (朝倉書店, 2014).
- [3] D.R. Nicholson, *Introduction to Plasma Theory* (Wiley, 1983); 小笠原正忠, 加藤鞆一[訳]: プラズマ物理の基礎 (丸善, 1986).
- [4] D.G. Swanson, *Plasma Kinetic Theory* (Chapman and Hall/CRC, 2008).
- [5] プラズマ・核融合学会[編]: プラズマシミュレーション (京都大学学術出版会, 2018).
- [6] 渡邊智彦, 洲鎌英雄: プラズマ・核融合学会誌 **81**, 534 (2005).
- [7] 渡邊智彦: プラズマ・核融合学会誌 **81**, 686 (2005).
- [8] 前山伸也: プラズマ・核融合学会誌 **91**, 589 (2015).
- [9] S. Maeyama *et al.*, Phys. Rev. Lett. **114**, 255002 (2015).
- [10] M. Nunami *et al.*, Phys. Plasmas **27**, 052501 (2020).
- [11] K. Fujita *et al.*, Plasma Fusion Res. **14**, 3403102 (2019).
- [12] J.P. Freidberg, *Ideal Magnetohydrodynamics* (Plenum, 1987).
- [13] M. Honda, Comput. Phys. Commun. **231**, 94 (2018).
- [14] B. Øksendal, *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications* (Springer, 2003); 谷口説男[訳]: 確率微分方程式—入門から応用まで (丸善, 1999).
- [15] A. Friedman, *Stochastic Differential Equations and Applications* (Dover, 2004).
- [16] 保江邦夫: 確率論 (数理物理学方法序説 4) (日本評論社, 2001).
- [17] 保江邦夫: 物理数学における微分方程式 (数理物理学方法序説別巻) (日本評論社, 2002).
- [18] 高橋陽一郎[編]: 伊藤清の数学 (日本評論社, 2011).
- [19] P. Helander and D.J. Sigmar, *Collisional Transport in Magnetized Plasmas*, Chapter 3 (Cambridge University Press, 2002).
- [20] P.E. Kloeden and E. Platen, *Numerical Solution of Stochastic Differential Equations* (Springer, 1999).
- [21] T. Misawa and H. Itakura, Phys. Rev. E **51**, 254 (1995).
- [22] J.R. Klauder and W.P. Petersen, SIAM J. Numer. Anal. **22**, 1153 (1985).
- [23] A.H. Boozer and G. Kuo-Petravic, Phys. Fluids **24**, 851 (1981).
- [24] 坂元慶行 他: 情報量統計学, 第 4 章 (共立出版, 1983).
- [25] R. Kanno *et al.*, Plasma Fusion Res. **6**, 2403066 (2011).
- [26] T. Takizuka and H. Abe, J. Comput. Phys. **25**, 205 (1977).
- [27] K. Nanbu and S. Yonemura, J. Comput. Phys. **145**, 639 (1998).
- [28] C. Wang *et al.*, J. Comput. Phys. **227**, 4308 (2008).
- [29] Y. Masaoka and S. Murakami, Plasma Fusion Res. **8**, 2403106 (2013).
- [30] G. Zhang and D. del-Castillo-Negrete, Phys. Plasmas **24**, 092511 (2017).
- [31] S. Satake *et al.*, Comp. Phys. Comm. **255**, 107249 (2020).
- [32] X.Q. Xu and M.N. Rosenbluth, Phys. Fluids B **3**, 627 (1991).
- [33] W.X. Wang *et al.*, Plasma Phys. Control. Fusion **41**, 1091 (1999).
- [34] S. Brunner *et al.*, Phys. Plasmas **6**, 4504 (1999).
- [35] S. Murakami *et al.*, Nucl. Fusion **40**, 693 (2000).
- [36] S. Murakami *et al.*, Nucl. Fusion **46**, S425 (2006).
- [37] S. Matsuoka *et al.*, Phys. Plasmas **22**, 072511 (2015).

- [38] H. Yamaguchi and S. Murakami, *Nucl. Fusion* **56**, 026003 (2016).
- [39] Y. Feng *et al.*, *J. Nucl. Mater.* **266-269**, 812 (1999).
- [40] A.M. Runov *et al.*, *Phys. Plasmas* **8**, 916 (2001).
- [41] M. Kobayashi *et al.*, *Contrib. Plasma Phys.* **44**, 25 (2004).
- [42] R. Tatsumi *et al.*, *Plasma Fusion Res.* **15**, 1403003 (2020).
- [43] プラズマ・核融合学会[編]: プラズマシミュレーション, 第7.4.1節 (京都大学学術出版会, 2018).
- [44] 桜井 淳: 日本原子力学会和文論文誌 **2**, 555 (2003).
- [45] S.C. Jardin *et al.*, *J. Comput. Phys.* **227**, 8769 (2008).
- [46] G. V. Pereverzev and G. Corrigan, *Comput. Phys. Commun.* **179**, 579 (2008).
- [47] J.H. Holland, *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*, second ed. (MIT Press, Cambridge, 1992).
- [48] C.R. Reeves, J.E. Rowe, *Genetic Algorithms: Principles and Perspectives* (Kluwer Academic Publishers, New York, 2002).
- [49] P. Charbonneau, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **101**, 309 (1995).
- [50] <http://www.hao.ucar.edu/modeling/pikaia/pikaia.php>
- [51] J. Candy *et al.*, *Phys. Plasmas* **16**, 060704 (2009).
- [52] M. Honda and A. Fukuyama, *Nucl. Fusion* **46**, 580 (2006).
- [53] M. Honda and E. Narita, *Phys. Plasmas* **26**, 102307 (2019).



さ たけ しん すけ
佐竹真介

自然科学研究機構 核融合科学研究所 ヘリカル研究部 核融合理論シミュレーション研究系 准教授, 2003年総合研究大学院大学 博士 (学術).

モンテカルロ法を使った3次元磁場配位中の新古典輸送現象, 新古典粘性のシミュレーションや最適化配位の研究が主なテーマ。乱数については深い思い入れがありますが, 特にギャンブル好きというわけではありません。



かんのりゅうたろう
菅野龍太郎

自然科学研究機構 核融合科学研究所 ヘリカル研究部 核融合理論シミュレーション研究系 准教授。乱数を用いた確率論的な計算手法であるモンテカルロ法全般に興味

があります。最近の研究では, プラズマの衝突輸送現象に対するモンテカルロ法に基づいたドリフト運動論シミュレーションを行っています。



ほんだみつる
本多 充

量子科学技術研究開発機構 那珂核融合研究所 先進プラズマ研究部 上席研究員。主にトカマク中の輸送現象や輸送シミュレーションを研究対象としていますが, 機械学

習やベイズ推定, 最適化問題にも興味を持っていて研究への応用を進めています。家族でカラオケボックスに行くことが多かったのですが, 昨今の情勢でなかなかまなりません。95点以上を獲れる曲を増やすのが目標です。