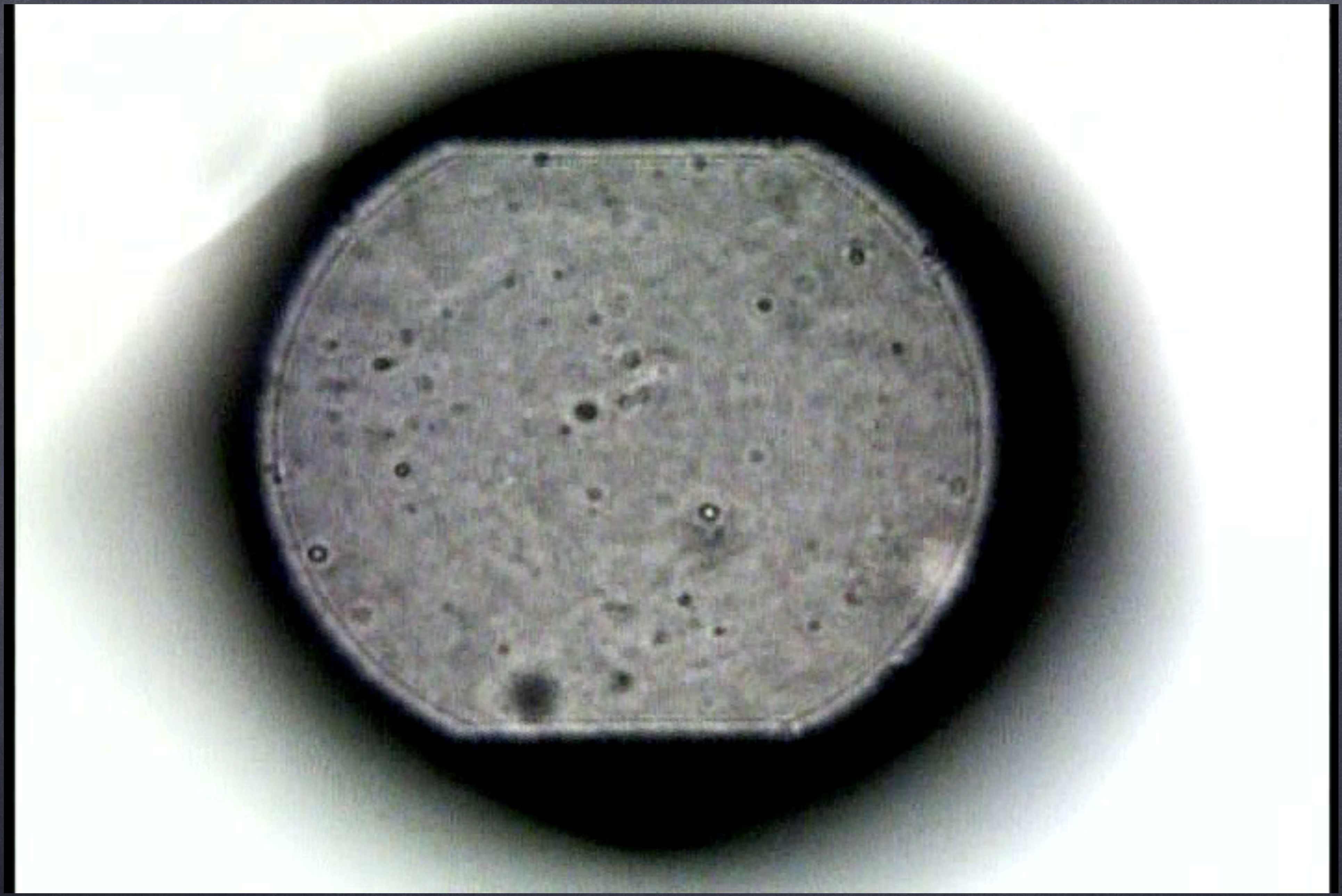
乱数作成とシミュレーション（教科書第９章）

静岡大学工学部　岡本正芳

ブラウン運動

- 水に花粉を浮かべると、花粉が生き物であるかのように動き回る現象を1827年にブラウンが発見した。
- 1905年アインシュタインは水分子が不規則に花粉に衝突することによってこの現象を理論的に説明することに成功した。

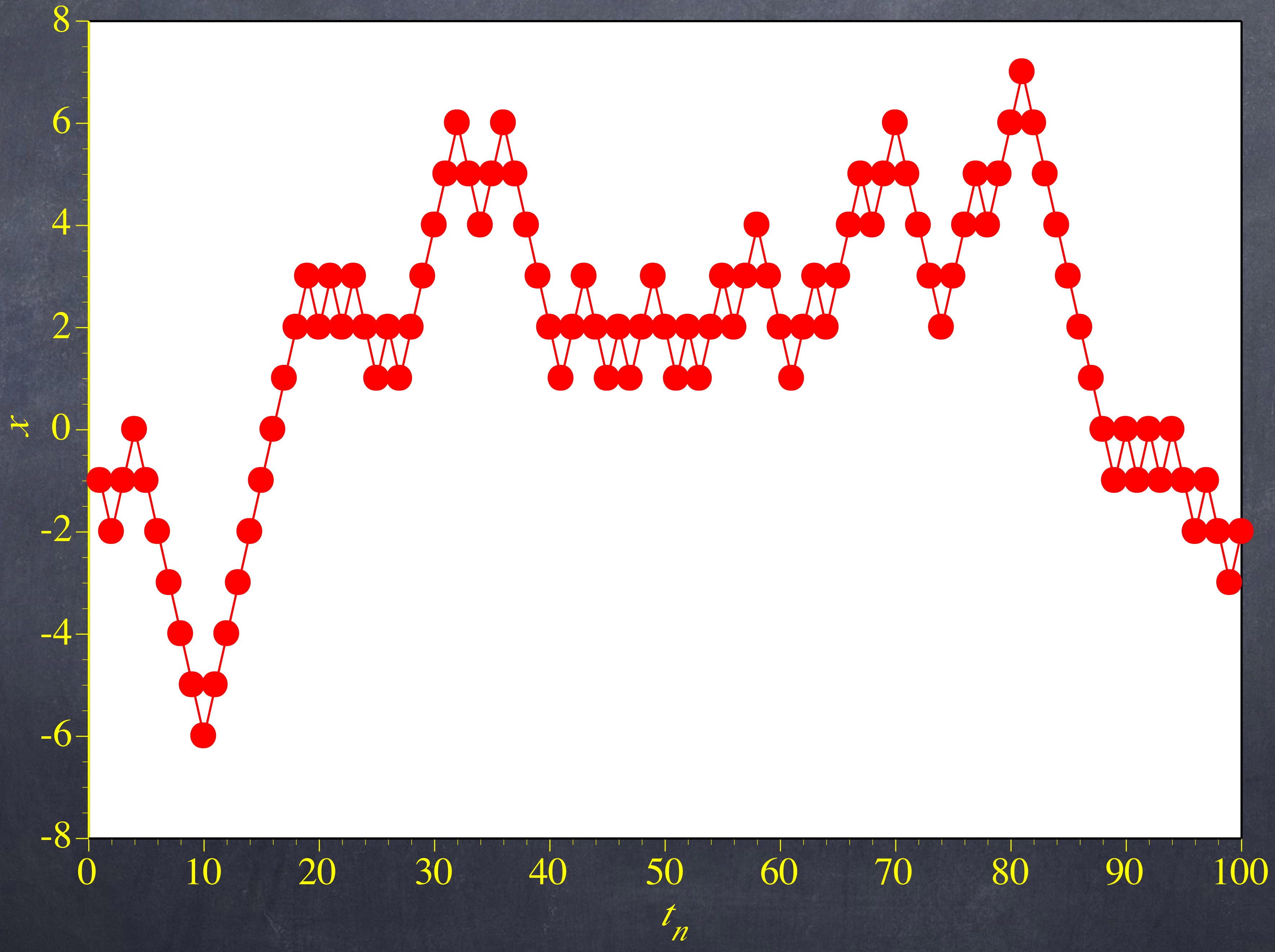
花粉のブラウン運動



ランダム・ウォーク

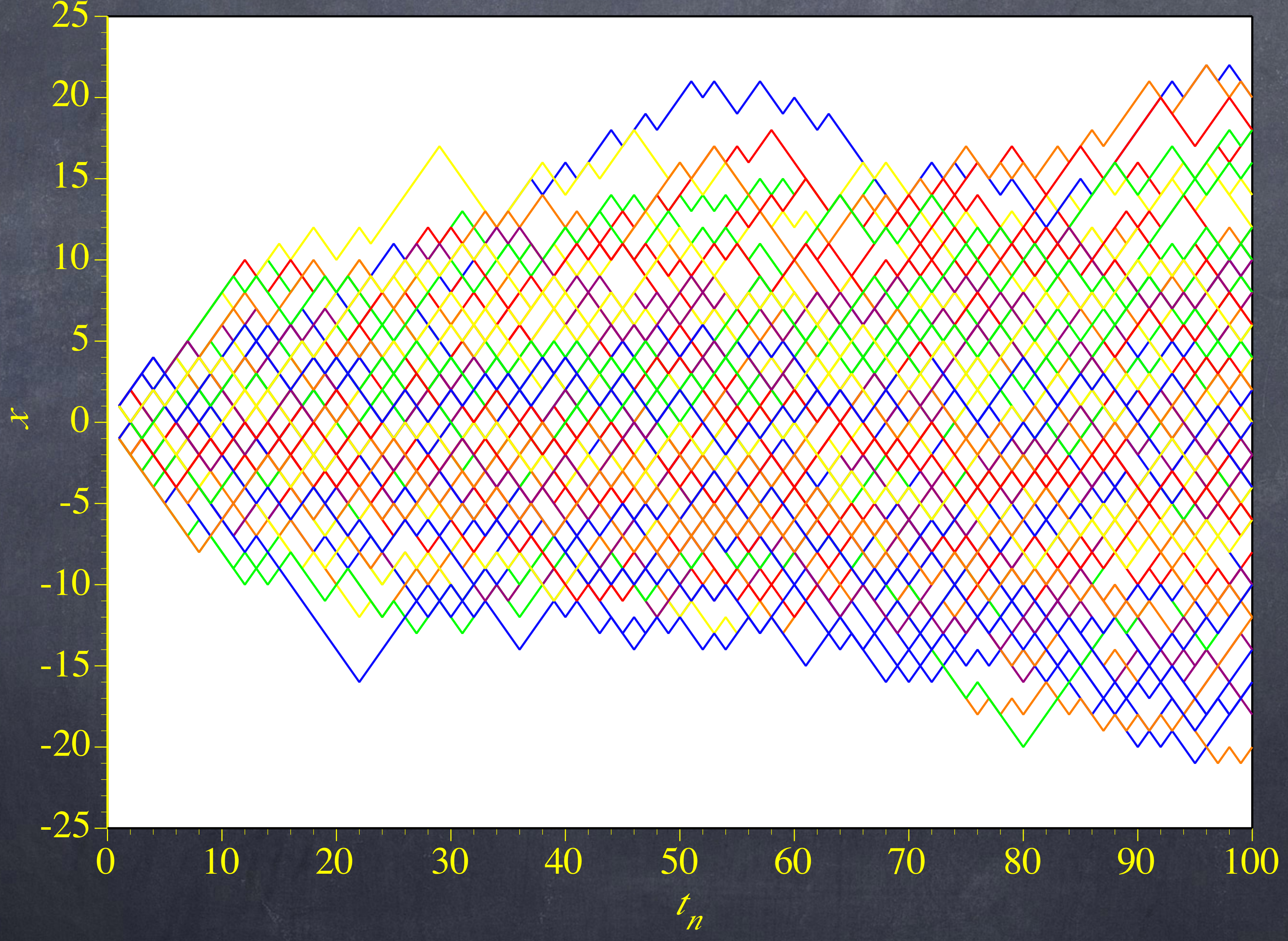
- 最初に原点(x=0)にいた粒子が、単位時間ごとにコインを投げて表が出れば右へ1、裏が出れば左へ1動いていくとする。時刻t=nでは粒子はどの位置xにいるか予測せよ。

1回の検討結果



揺らいで運動していく様子が見られる。

100回の検討結果



時間経過につれて広がって行く様子が見られる。

数学的処理 1

右へ移動する回数をn_+、

左に移動する回数をn_-とする。

$$n_+ + n_- = n$$

$$n_+ - n_- = x$$

数学的処理２

- 確率変数をn_+と設定すると、n回中n_+回表が出る問題となり、２項分布B(n,1/2) に従う。

$$p\left(n_+\right) = {}_nC_{n_+}\left(\frac{1}{2}\right)^{n_+}\left(1-\frac{1}{2}\right)^{n-n_+} = \frac{n!}{n_+!\left(n-n_+\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^n$$

総回数と位置を変数とする確率関数

$$p\left(n,x\right) = \frac{n!}{\left(\frac{n+x}{2}\right)!\left(\frac{n-x}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^n$$

平均と分散

$$E\left[n_+\right] = \sum_{n_+=0}^{n} n_+ p\left(n_+\right) = \frac{n}{2}$$

$$E\left[\left(n_+ - \frac{n}{2}\right)^2\right] = \frac{n}{4}$$

位置を変数とする場合

$$E\left[x\right] = E\left[2n_+ - n\right] = 2E\left[n_+\right] - nE\left[1\right] = n - n = 0$$

$$E\left[x^2\right] = E\left[\left(2n_+ - n\right)^2\right] = 4E\left[n_+^2\right] - 4nE\left[n_+\right] + n^2 E\left(1\right)$$

$$= 4\frac{n}{4} + 4E^2\left[n_+\right] - 2n^2 + n^2 = n + 4\frac{n^2}{4} - 2n^2 + n^2 = n$$

離散から連続へ

- ２項分布は正規分布で近似評価できるので、
  平均0と分散nの正規分布

$$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi n}}e^{-\frac{x^2}{2n}}$$

本当かなあ？

証明

確率関数の対数

$$\log p(n,x) = \log \frac{n!}{\left(\frac{n+x}{2}\right)!\left(\frac{n-x}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^n$$

$$= \boxed{\log n! - \log\left(\frac{n+x}{2}\right)! - \log\left(\frac{n-x}{2}\right)!} - n\log 2$$

この項の変換が必要

スターリングの公式

- nが大きいとき

$$\log n! \cong \left(n+\frac{1}{2}\right)\log n - n + \frac{1}{2}\log(2\pi)$$

$$\log p(n,x) = \log n! - \log\left(\frac{n+x}{2}\right)! - \log\left(\frac{n-x}{2}\right)! - n\log 2$$

$$\cong \left(n+\frac{1}{2}\right)\log n - n + \frac{1}{2}\log(2\pi) - n\log 2$$

$$-\left(\frac{n+x}{2}+\frac{1}{2}\right)\log\frac{n+x}{2} + \frac{n+x}{2} - \frac{1}{2}\log(2\pi)$$

$$-\left(\frac{n-x}{2}+\frac{1}{2}\right)\log\frac{n-x}{2} + \frac{n-x}{2} - \frac{1}{2}\log(2\pi)$$

$$= \log 2 - \frac{1}{2}\log(2\pi n) - \frac{n+x+1}{2}\log\left(1+\frac{x}{n}\right)$$

$$-\frac{n-x+1}{2}\log\left(1-\frac{x}{n}\right)$$

対数展開公式

$$\log\left(1 \pm \frac{x}{n}\right) = \pm\frac{x}{n} - \frac{1}{2}\frac{x^2}{n^2} \pm \frac{1}{3}\frac{x^3}{n^3} + \cdots$$

$$\log p(n,x) \cong \log 2 - \frac{1}{2}\log(2\pi n) - \frac{n+x+1}{2}\frac{x}{n} + \frac{n+x+1}{4}\frac{x^2}{n^2} + \cdots$$

$$+\frac{n-x+1}{2}\frac{x}{n} + \frac{n-x+1}{4}\frac{x^2}{n^2} + \cdots$$

$$= \log 2 - \log\sqrt{2\pi n} - \frac{x^2}{2n}$$

無視

近似確率関数

$$\log p(n,x) \cong \log \frac{2}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{x^2}{2n}}$$

$$p(n,x) \cong \frac{2}{\sqrt{2\pi n}} e^{-\frac{x^2}{2n}} = \delta x f(x)$$

δｘはこの場合２ですよ。qed

ここまでのまとめ

- ランダム・ウォークは離散的な２項分布にしたがっている。
- 連続化すると正規分布に従う現象である。

確率関数の漸化式

$$p(x,n+1)=\frac{1}{2}\left(p(x+1,n)+p(x-1,n)\right)$$

証明

$$\frac{1}{2}\left(p(x+1,n)+p(x-1,n)\right)=\frac{n!}{\left(\frac{n+x+1}{2}\right)!\left(\frac{n-x-1}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}+\frac{n!}{\left(\frac{n+x-1}{2}\right)!\left(\frac{n-x+1}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}$$

$$=\frac{n!}{\left(\frac{n+1+x}{2}\right)!\left(\frac{n+1-x}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}\left(\frac{n+1-x}{2}+\frac{n+1+x}{2}\right)$$

$$=\frac{(n+1)!}{\left(\frac{n+1+x}{2}\right)!\left(\frac{n+1-x}{2}\right)!}\left(\frac{1}{2}\right)^{n+1}=p(x,n+1)$$

漸化式の変数変換

$$p(x,n+1)-p(x,n)=\frac{1}{2}\left(p(x+1,n)-2p(x,n)+p(x-1,n)\right)$$

$$\xi = x\varepsilon$$

$$t = n\delta$$

$$p(x,n) = f(\xi,t)\Delta\xi$$

$$\frac{f(\xi,t+\delta)-f(\xi,t)}{\delta}=\frac{\varepsilon^2}{2\delta}\frac{f(\xi+\varepsilon,t)-2f(\xi,t)+f(\xi-\varepsilon,t)}{\varepsilon^2}$$

拡散係数　$D = \dfrac{\varepsilon^2}{2\delta}$

ε と δ を無限小化する

$$\frac{\partial f(\xi,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f(\xi,t)}{\partial \xi^2}$$

拡散方程式

拡散方程式の解

$$\frac{\partial f(\xi,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 f(\xi,t)}{\partial \xi^2}$$

$$f(\xi,t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left(-\frac{\xi^2}{4Dt}\right)$$

教科書にミスあります

正規分布 $\Rightarrow$ $\sigma^2 = 2Dt$

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}}e^{-\frac{x^2}{2n}}$$

まとめ

- ランダム・ウォークは拡散方程式に帰着化する。微視的粒子挙動が巨視的場の評価に自然につながっていることがわかる。
- 正規分布の説明の際に話したように、拡散方程式の解は正規分布となっていき、一貫性が確認できる。

乱数作成方法

- 一様乱数（一様分布）
- 正規乱数（正規分布）
- 線形増加乱数
- 三角乱数（三角分布）
- 指数乱数（指数分布）
- ポアソン乱数（ポアソン分布）

一様乱数作成

- 合同式法

ある定数a, c, m, r_0を決めておき

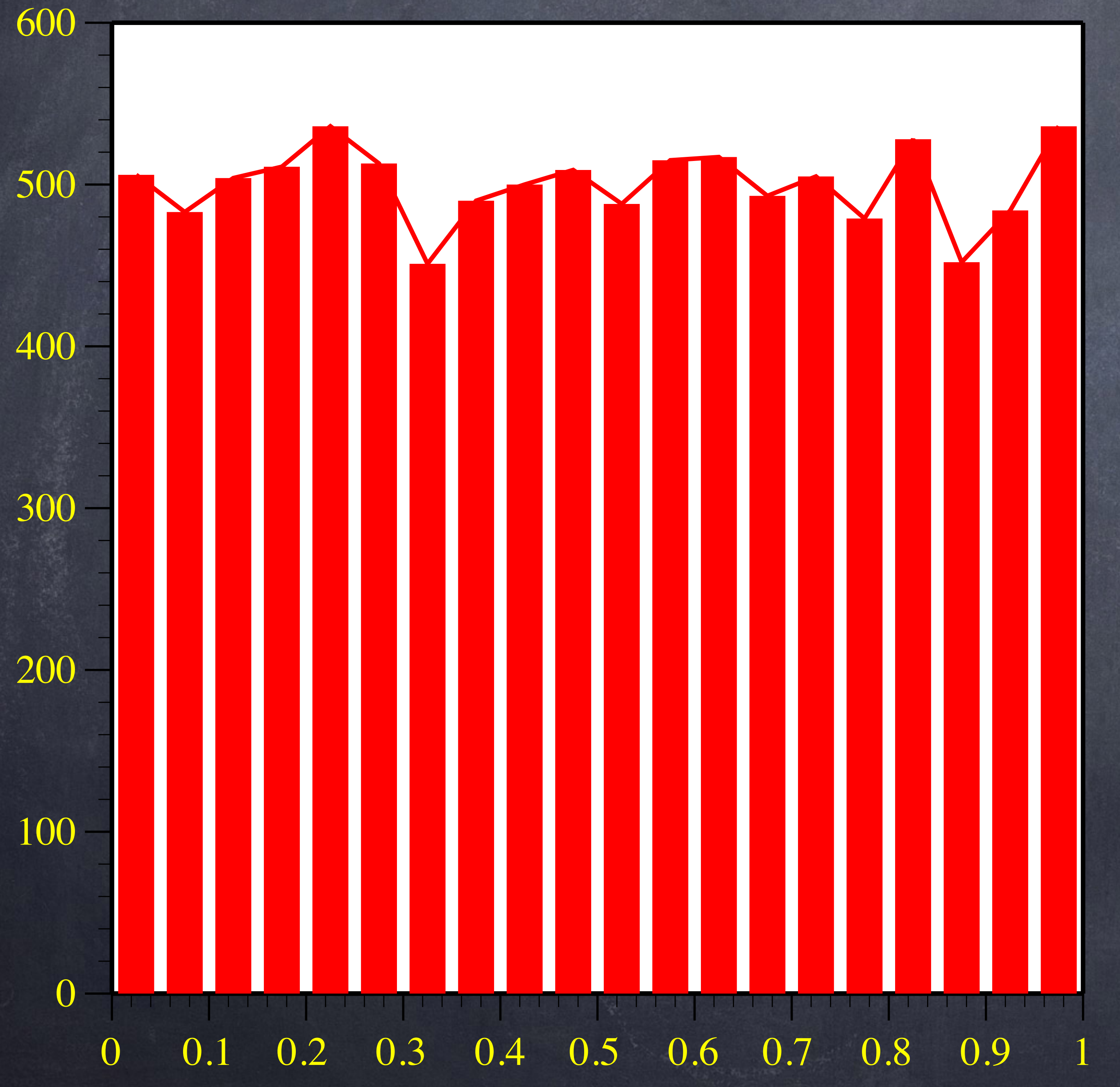
$$A = ar_0 + c \qquad \cdots \qquad A = ar_n + c$$

$$r_1 = \mathrm{mod}(A, m) \qquad \cdots \qquad r_{n+1} = \mathrm{mod}(A, m)$$

0 〜 1 の乱数なら

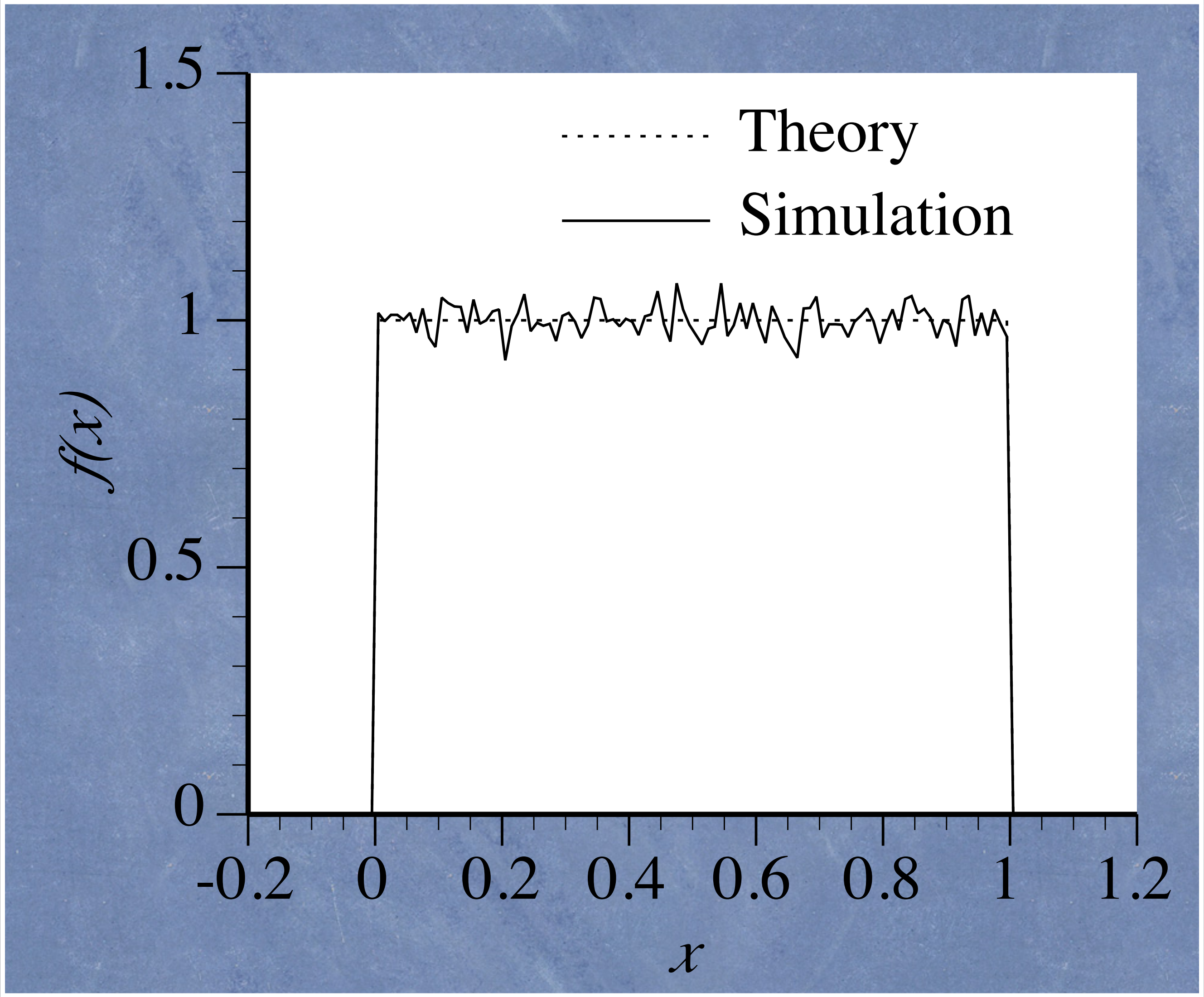
$$x_n = \frac{r_n}{m}$$

一様乱数結果.1



最大個数mで周期性が表れることに注意が必要である。

一様乱数結果.2



α =0, β =1

	理論値	乱数
μ	0.5	0.49944
σ^2	0.08333	0.08343
S	0	0.00227
F	1.8	1.7982

正規乱数作成

- 中心極限定理の応用

$$y_n = \frac{x_n^1 + x_n^2 + \cdots + x_n^{m-1} + x_n^m}{m} - \frac{1}{2}$$

mシリーズの一様乱数を使用

正規乱数作成

- ボックス・ミュラー法

$$y_1 = \sqrt{-2\log x_1}\cos(2\pi x_2)$$

$$y_2 = \sqrt{-2\log x_1}\sin(2\pi x_2)$$

２シリーズの一様乱数を使用

証明

$$x_1 = e^{-\frac{y_1^2 + y_2^2}{2}}$$

$$x_2 = \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{y_2}{y_1}$$

$$\begin{pmatrix} dy_1 \\ dy_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dx_1 \\ dx_2 \end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial x_1} = -\frac{1}{x_1 \sqrt{-2 \log x_1}} \cos(2\pi x_2)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial x_1} = -\frac{1}{x_1 \sqrt{-2 \log x_1}} \sin(2\pi x_2)$$

$$\frac{\partial y_1}{\partial x_2} = -2\pi \sqrt{-2 \log x_1} \sin(2\pi x_2)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial x_2} = 2\pi \sqrt{-2 \log x_1} \cos(2\pi x_2)$$

逆変換

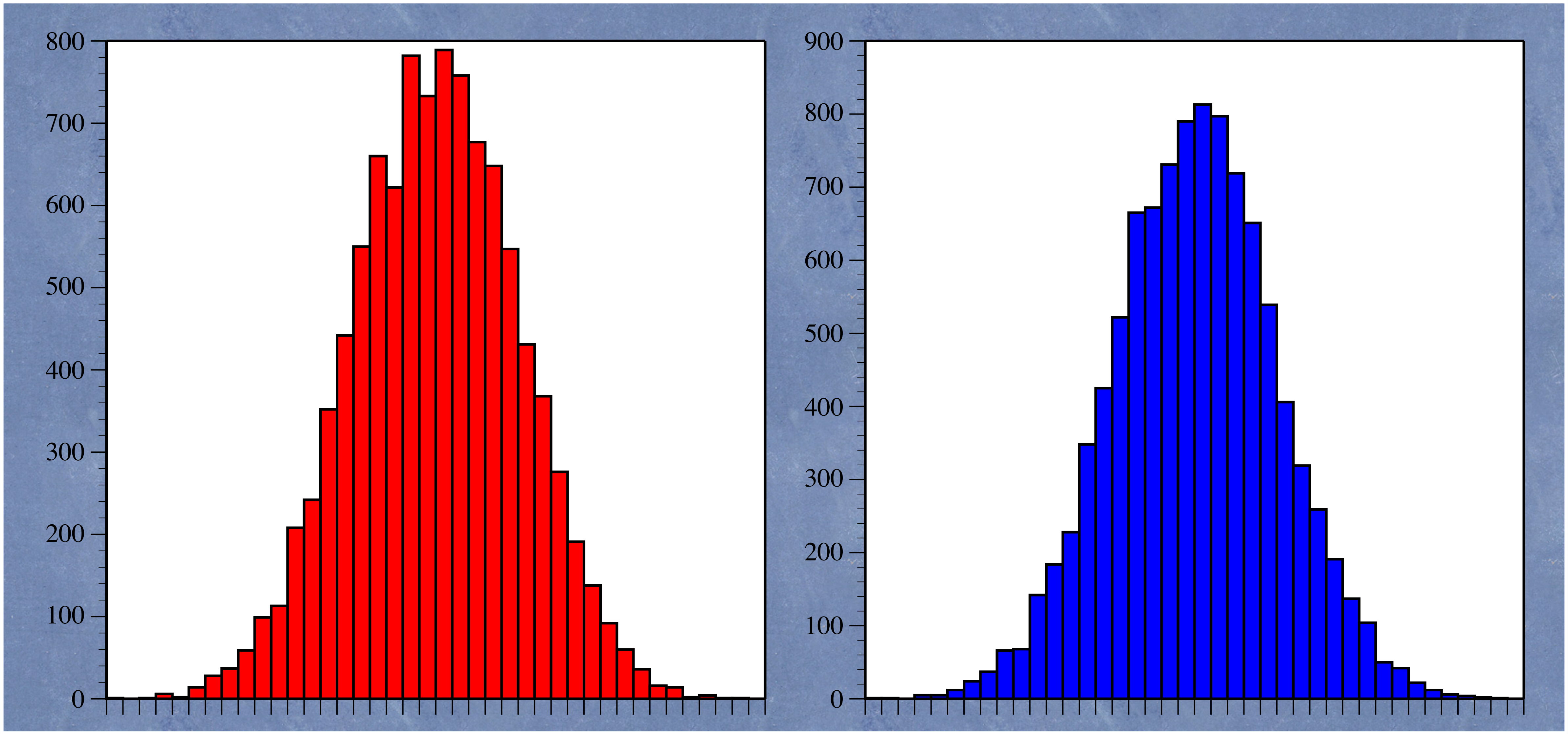
$$\begin{pmatrix} dx_1 \\ dx_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_1}{\partial y_2} \\ \dfrac{\partial x_2}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_2}{\partial y_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} dy_1 \\ dy_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} dy_1 \\ dy_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_1}{\partial y_2} \\ \dfrac{\partial x_2}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_2}{\partial y_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}^{-1} = -\frac{x_1}{2\pi} \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_2}{\partial x_2} & -\dfrac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ -\dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} \end{pmatrix} = -\frac{x_1}{2\pi} \begin{pmatrix} 2\pi\sqrt{-2\log x_1}\cos(2\pi x_2) & 2\pi\sqrt{-2\log x_1}\sin(2\pi x_2) \\ \dfrac{1}{x_1\sqrt{-2\log x_1}}\sin(2\pi x_2) & -\dfrac{1}{x_1\sqrt{-2\log x_1}}\cos(2\pi x_2) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad dx_1 dx_2 = \begin{vmatrix} \dfrac{\partial x_1}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_1}{\partial y_2} \\ \dfrac{\partial x_2}{\partial y_1} & \dfrac{\partial x_2}{\partial y_2} \end{vmatrix} dy_1 dy_2 = \frac{e^{-\frac{y_1^2+y_2^2}{2}}}{2\pi} dy_1 dy_2$$

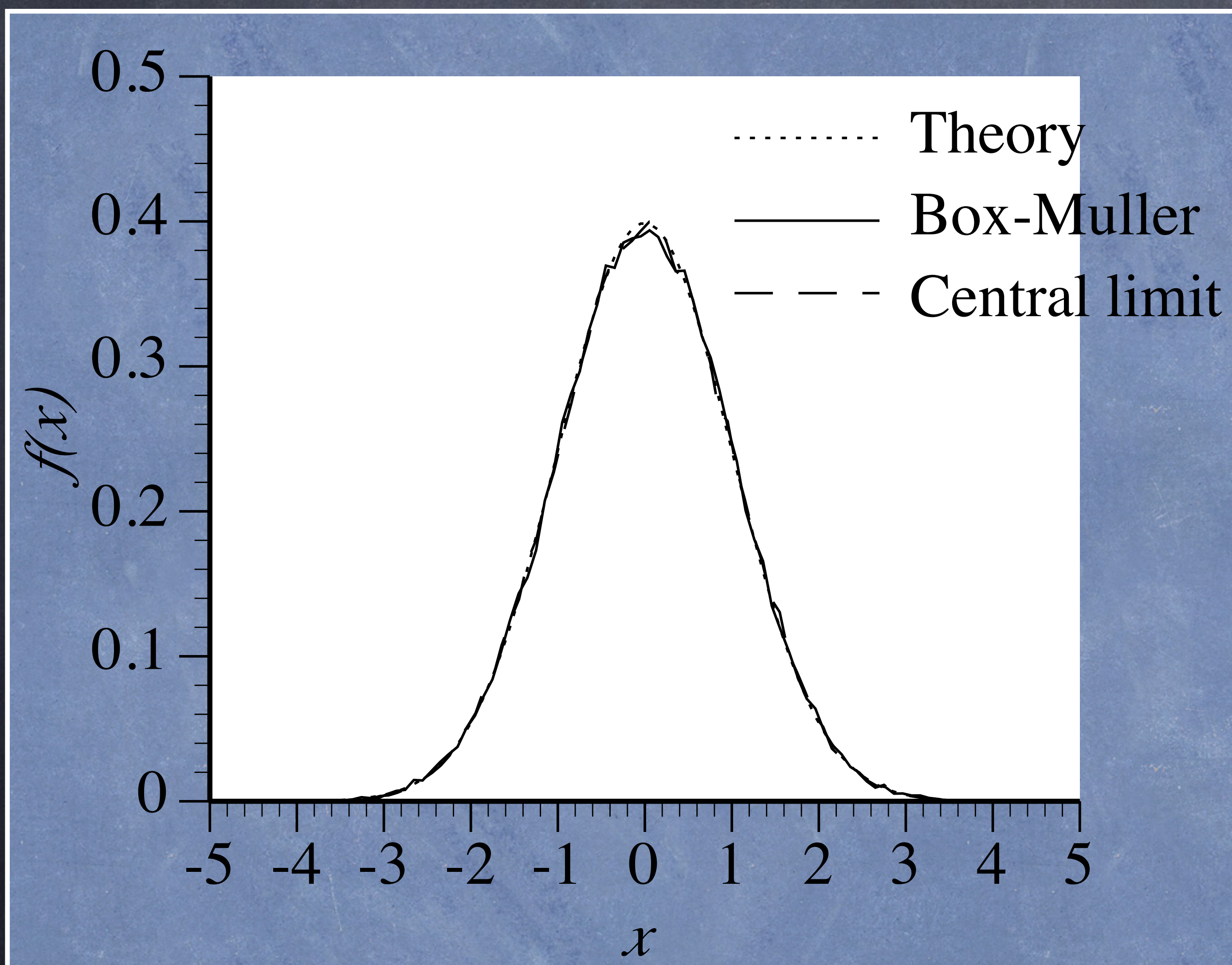
qed.

正規乱数結果



中心極限定理　　ボックス・ミュラー法

標準正規乱数結果



	理論値	CL	BM
μ	0	.002489	.00418
σ^2	1	0.99764	1.0071
S	0	0.00594	.001852
F	3	2.9239	2.9847

線形増加乱数作成

- 0~aの値をとり、その値が増加するにつれて高確率となる分布の乱数

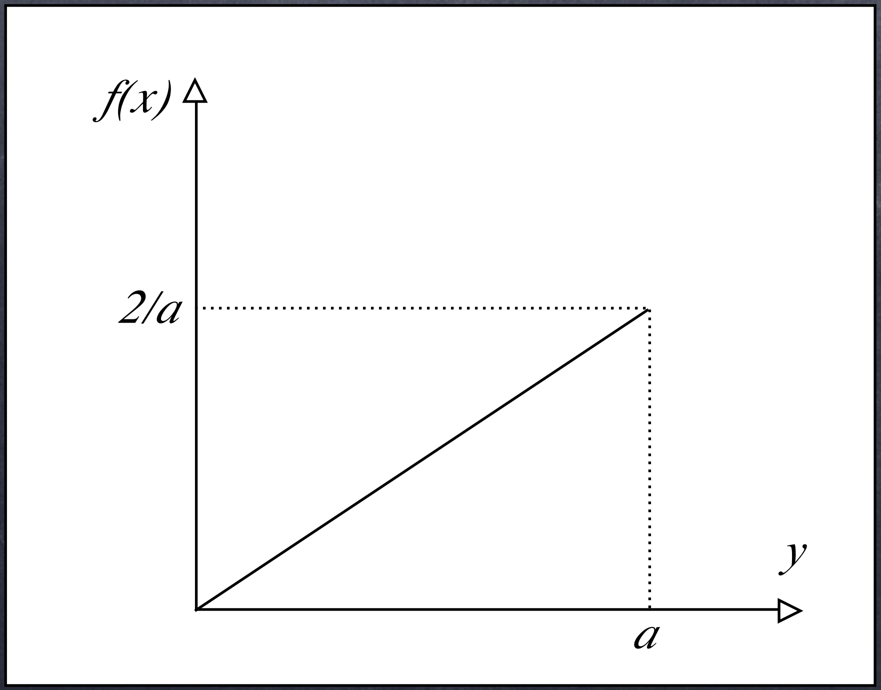
$$y = a\sqrt{x}$$

1 シリーズの一様乱数xを使用

証明

$$x = \left(\frac{y}{a}\right)^2 \qquad dx = \frac{2}{a^2} y dy$$

$$\Rightarrow \qquad f(y) = \frac{2}{a^2} y$$



三角乱数作成

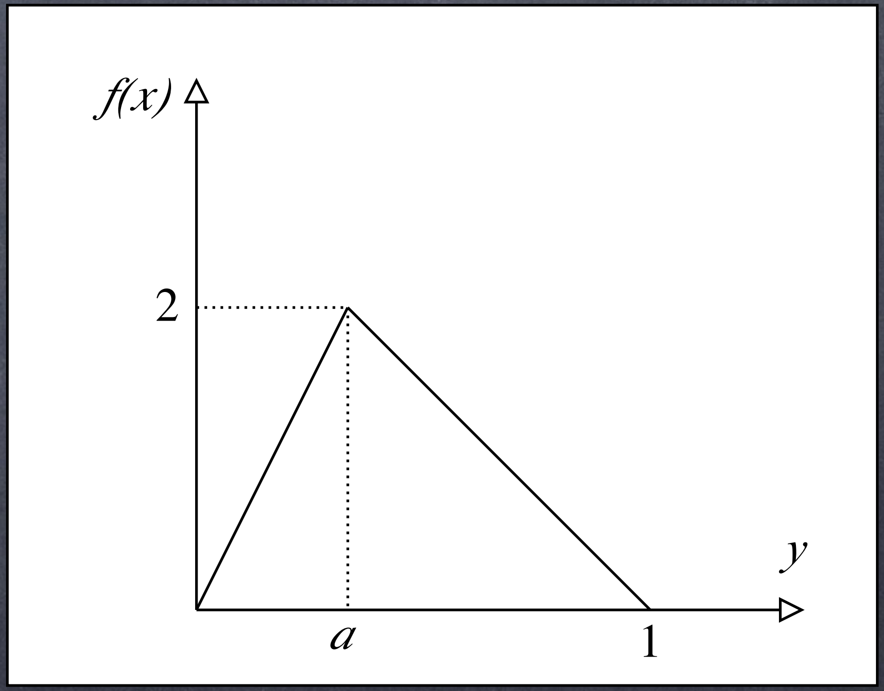
- 0~a間で線形的に確率が増加し、a~1間で線形的に確率が減少していく三角分布の乱数

$$y = \sqrt{ax}$$

$$0 \le x \le a$$

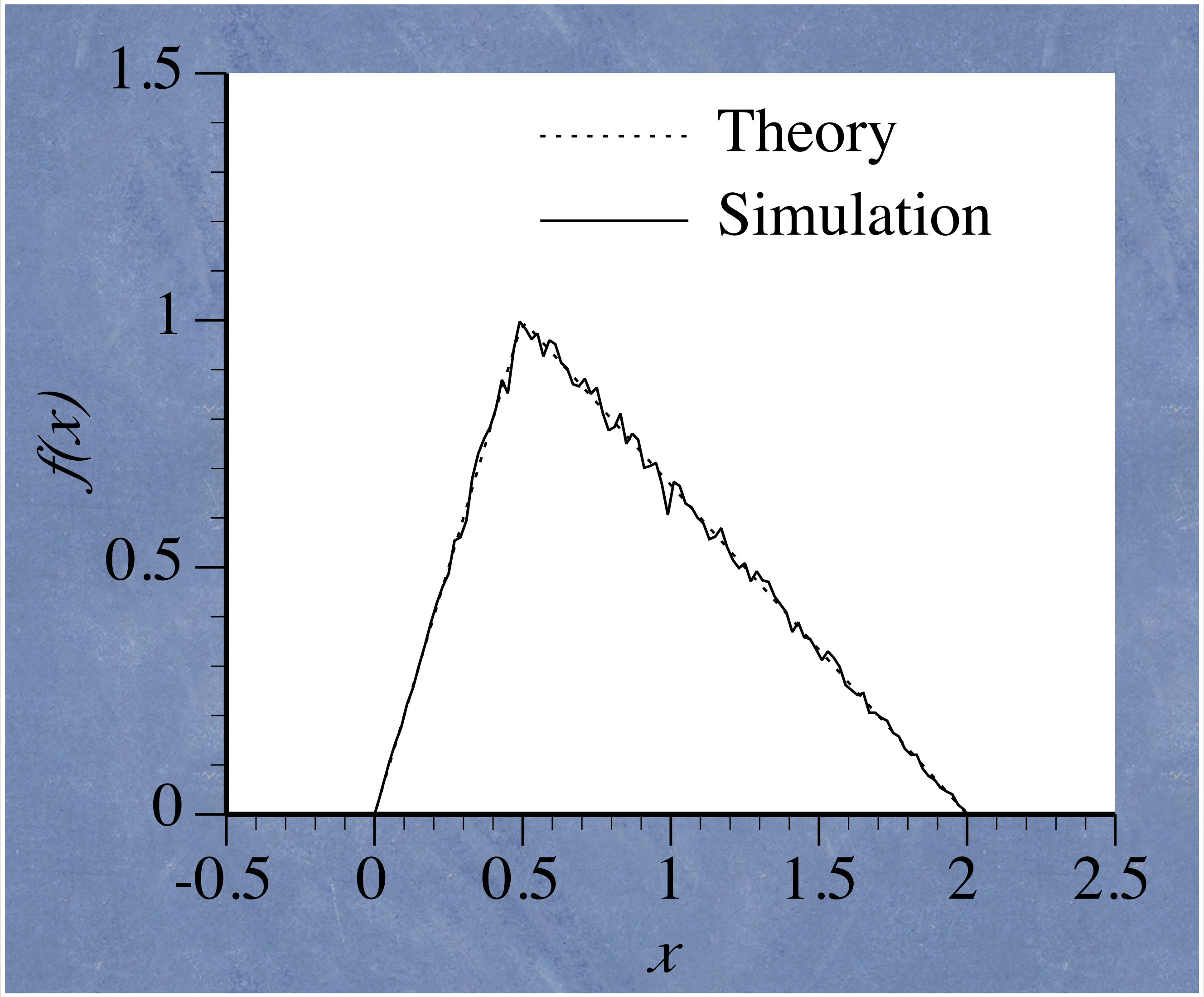
$$y = 1 - \sqrt{(1-a)(1-x)}$$

$$a \le x \le 1$$



1シリーズの一様乱数xを使用

三角乱数結果



	理論値	乱数
μ	0.8333	0.83253
σ^2	0.18056	0.18062
S	0.4224	0.42208
F	2.4	2.3965

$\alpha=0$, $\gamma=0.5$, $\beta=2$

指数乱数作成

- パラメーター λ に関する指数分布に従う乱数

$$y = -\frac{1}{\lambda}\log x$$

証明

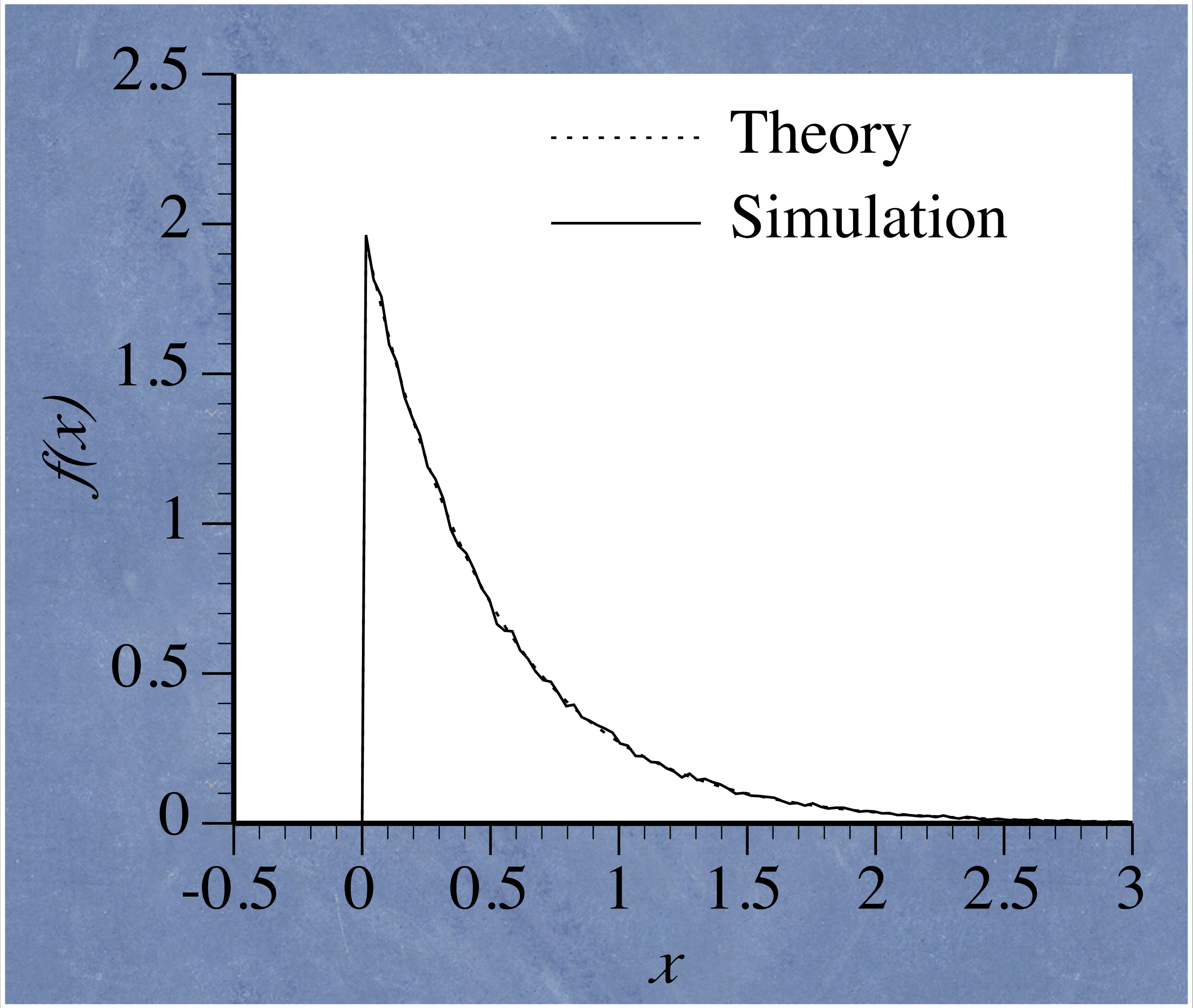
$$x = e^{-\lambda y}$$

$$dx = \lambda e^{-\lambda y} dy$$

$$f(y) = \lambda e^{-\lambda y}$$

1 シリーズの一様乱数xを使用

指数乱数結果



$\lambda=2$

	理論値	乱数
μ	0.5	0.49926
σ^2	0.25	0.25013
S	2	2.0262
F	9	9.3147

ポアソン乱数作成

- 一様乱数をパラメーターλを決めて以下のように数列を作る

$$y_0 = e^{\lambda} x_0$$

$$y_1 = y_0 x_1$$

$$y_i = y_{i-1} x_i$$

数列が1を始めて下回る番号がポアソン乱数となっている。

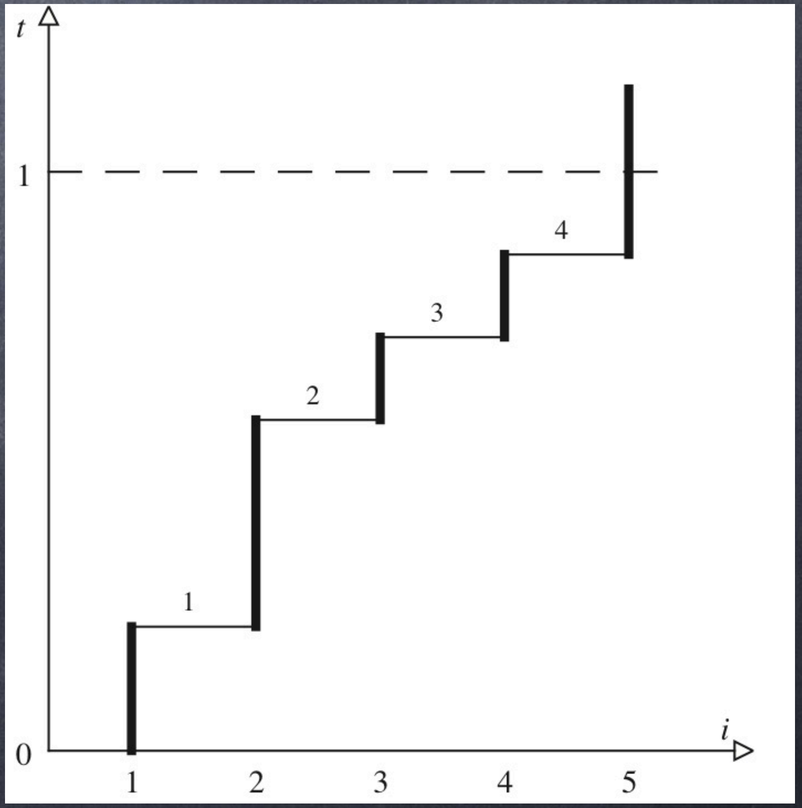
ポアソン乱数作成の証明

- 指数分布とポアソン分布の関連性からあるλの単位時間あたりでの目的事象の発生回数がポアソン分布であることを考えると

$$\sum_{i=1}^{j+1} t_i > 1$$

j ポアソン乱数

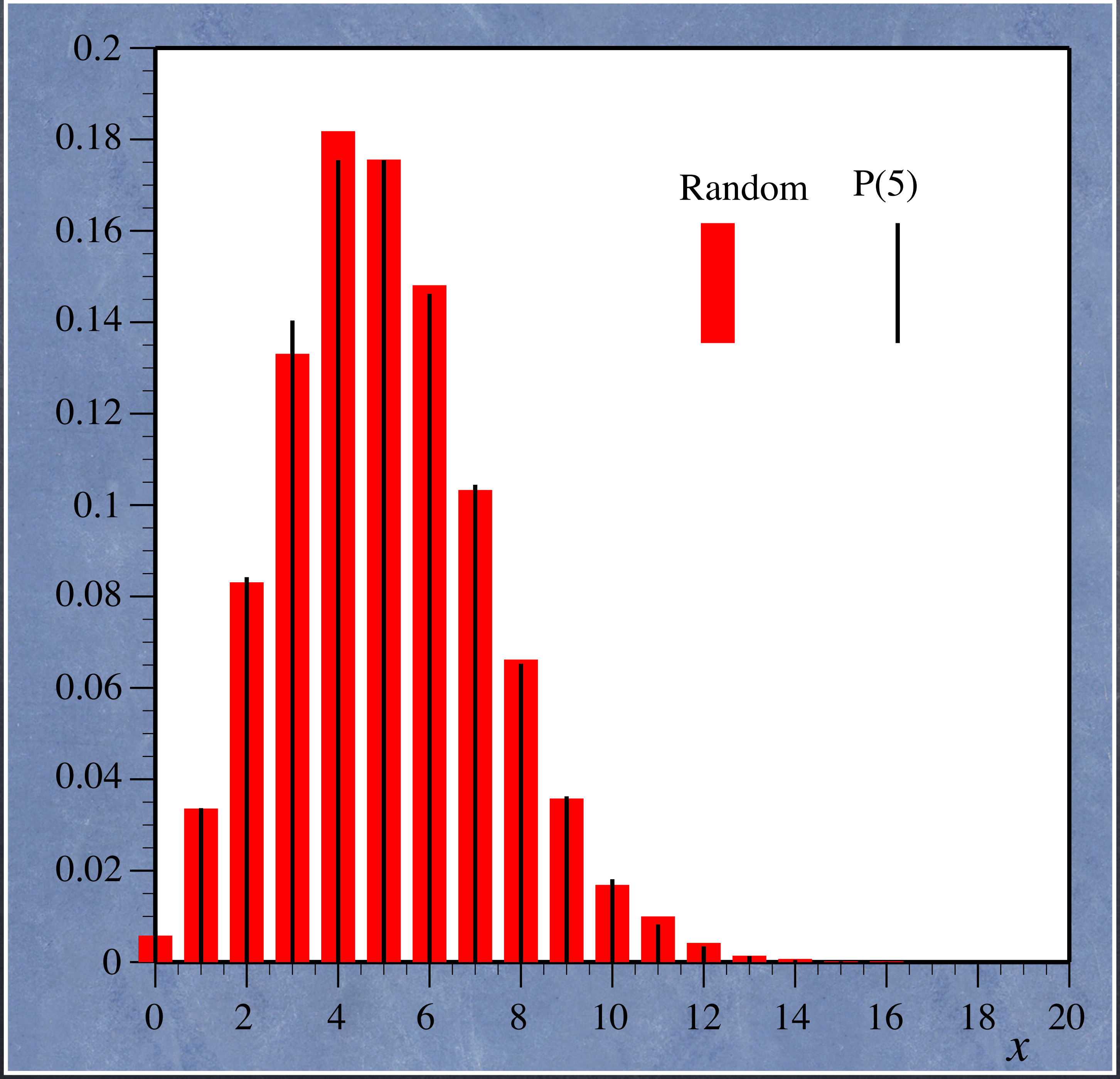
t 指数乱数



$$\sum_{i=1}^{j+1} -\frac{1}{\lambda}\log\left(1-x_i\right) = \frac{1}{\lambda}\log\frac{1}{\prod_{i=1}^{j+1}\left(1-x_i\right)} > 1$$

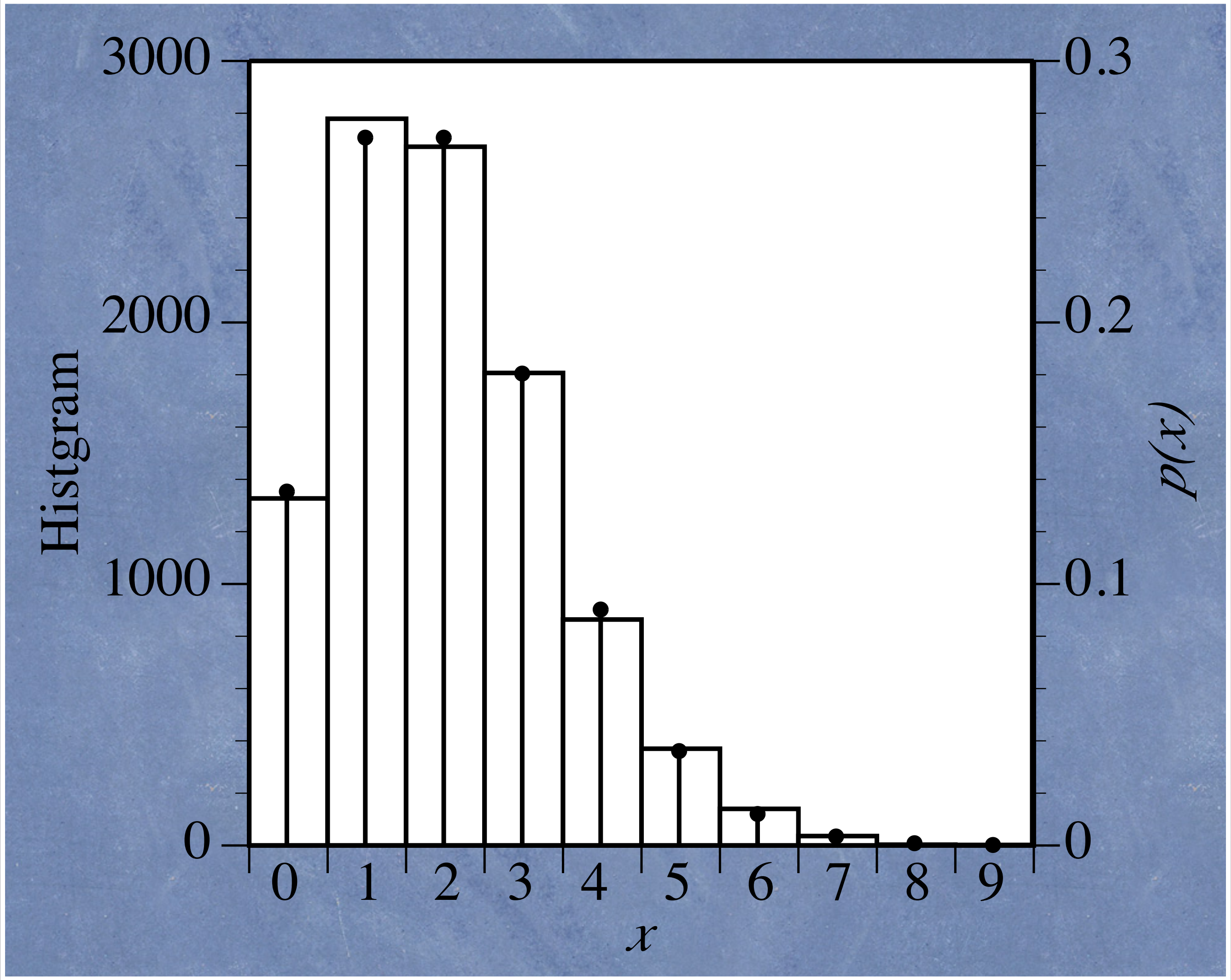
$$1 > e^{\lambda}\prod_{i=1}^{j+1}\left(1-x_i\right) \xrightarrow{x_i' = 1 - x_i} 1 > e^{\lambda}\prod_{i=1}^{j+1} x_i'$$

ポアソン乱数結果.1



Random
P(5)
0.2
0.18
0.16
0.14
0.12
0.1
0.08
0.06
0.04
0.02
0
0
2
4
6
8
10
12
14
16
18
20
x

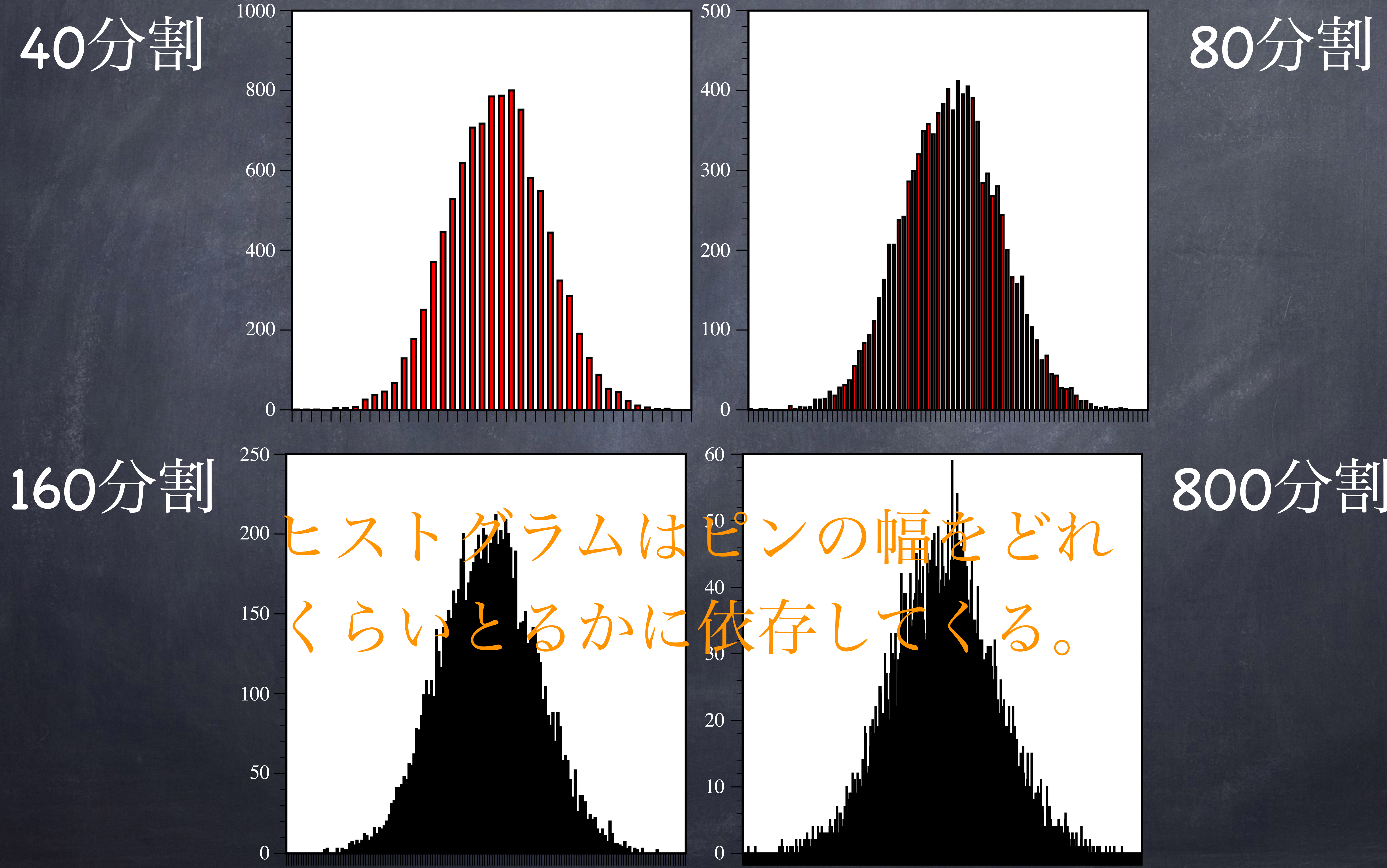
ポアソン乱数結果.2



	理論値	乱数
μ	2	1.9984
σ^2	2	2.0026
S	0.70711	0.71293
F	3.5	3.4104

$\lambda = 2$

ヒストグラム



確率密度関数評価方法

個々の区間の該当データー　　データー総数

$$n_{X-\Delta X/2<x<X+\Delta X/2} = n_i \qquad \sum_i n_i = N$$

個々の区間にデーターが該当する確率

$$p_i = \frac{n_i}{N}$$

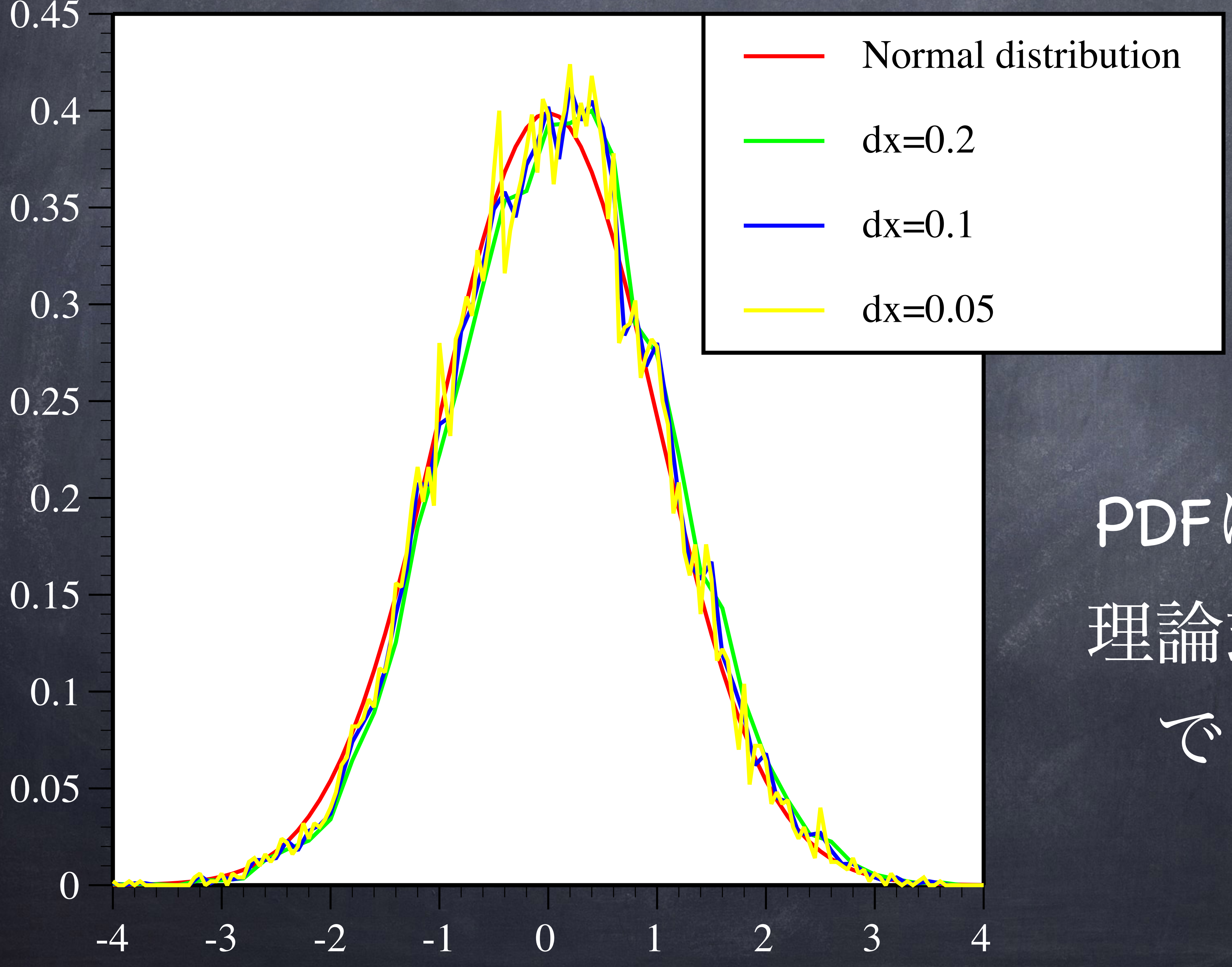
$$p_i = p\left(X - \Delta X/2 < x < X + \Delta X/2\right) = \int_{X-\Delta x/2}^{X+\Delta X/2} dx f\left(x\right)$$

$$\approx \Delta X f\left(X\right)$$

離散データーからPDFを近似的に算出する方法

$$f\left(X\right) = \frac{n_i}{\Delta X N}$$

PDF評価



PDFにすれば
理論式と比較
できる。

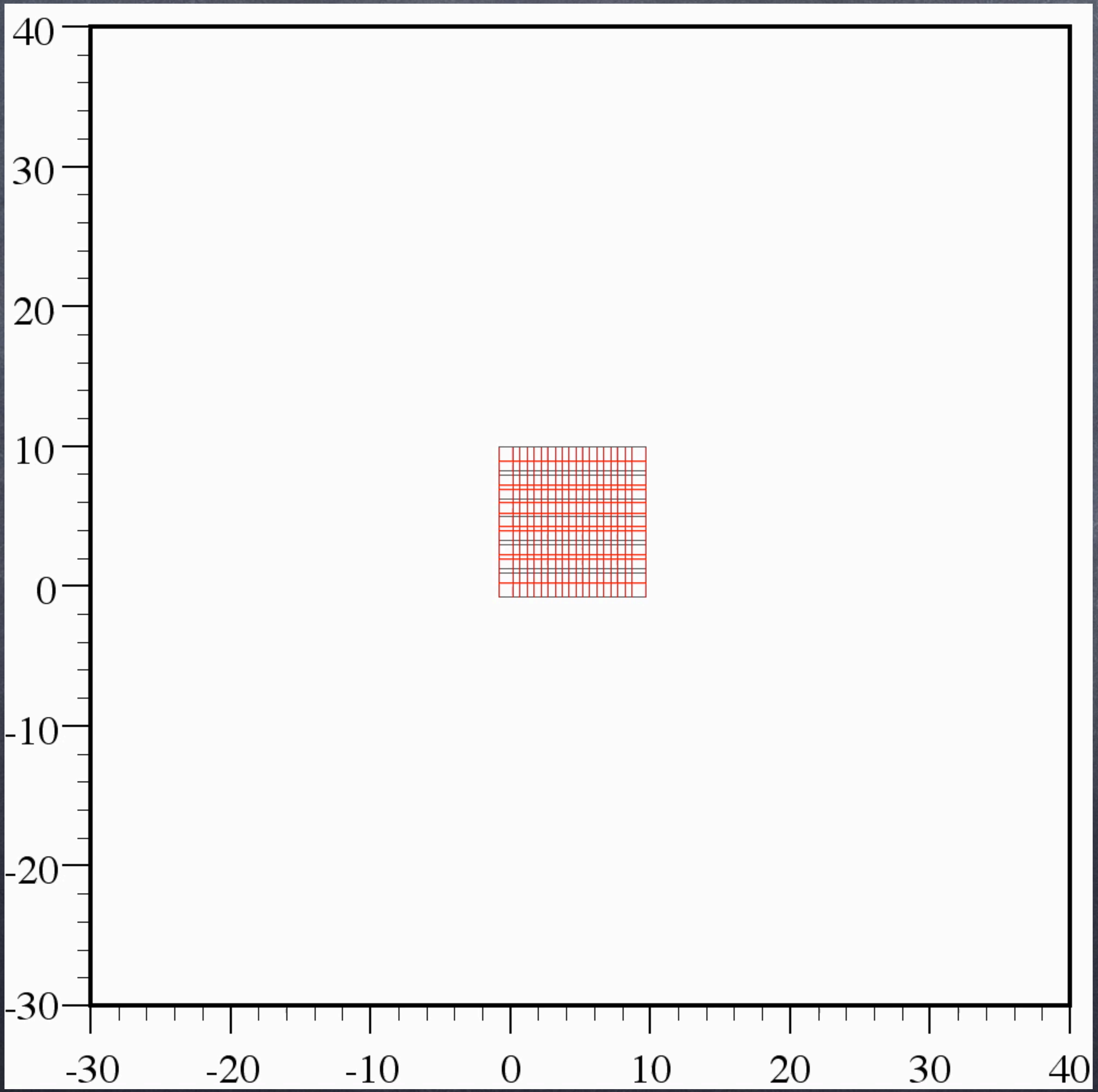
乱数の応用

２Dランダム・ウォーク

- ２次元ランダム・ウォーク（一様乱数シミュレーション）

$$x_n = x_{n-1} + \cos\left(2\pi\theta_{n-1}\right)$$
$$y_n = y_{n-1} + \sin\left(2\pi\theta_{n-1}\right)$$

一様乱数による
シミュレーション



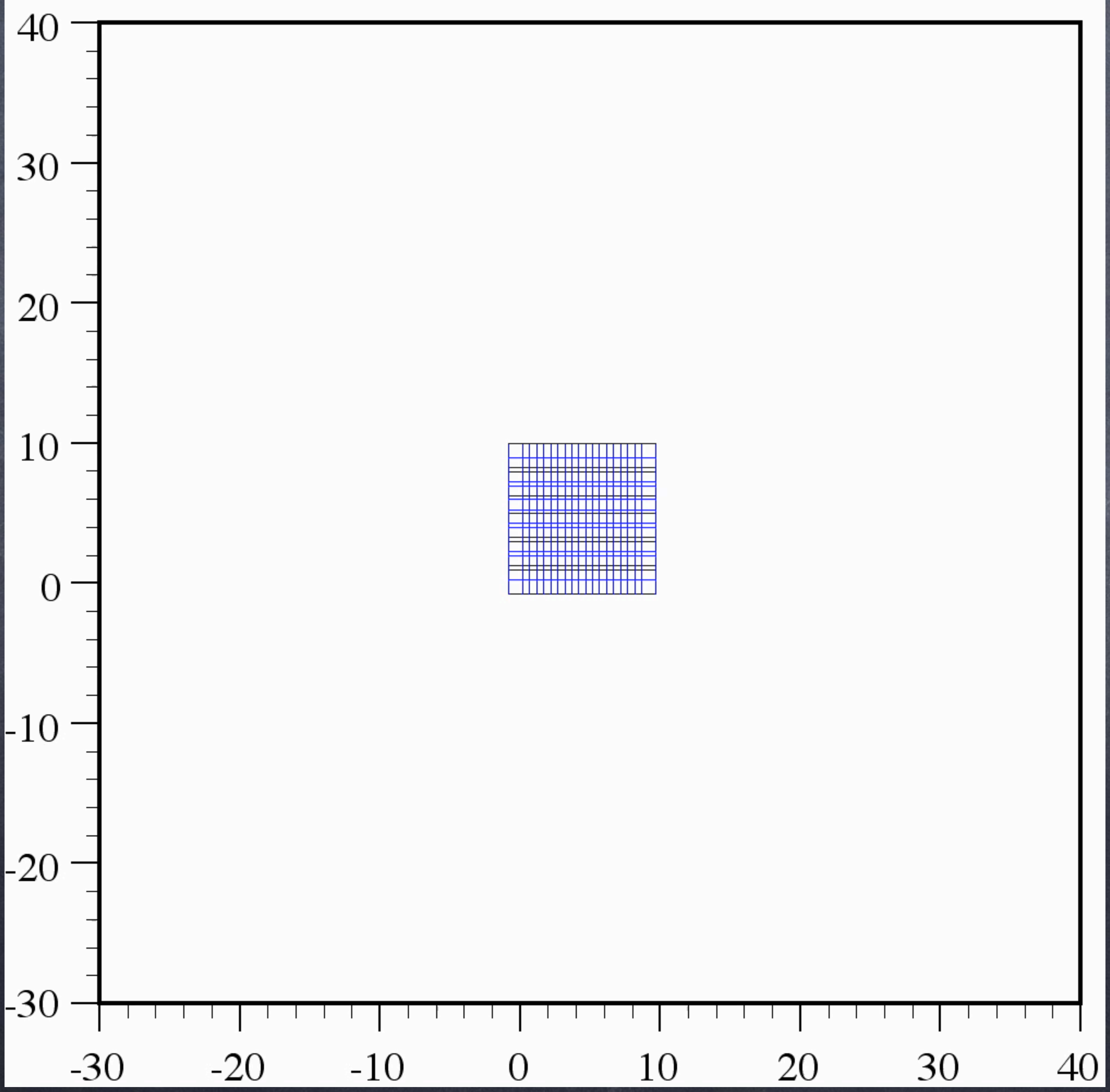
２Dランダム・ウォーク

- ２次元ランダム・ウォーク（正規乱数シミュレーション）

$$x_n = x_{n-1} + f_{n-1}^x$$

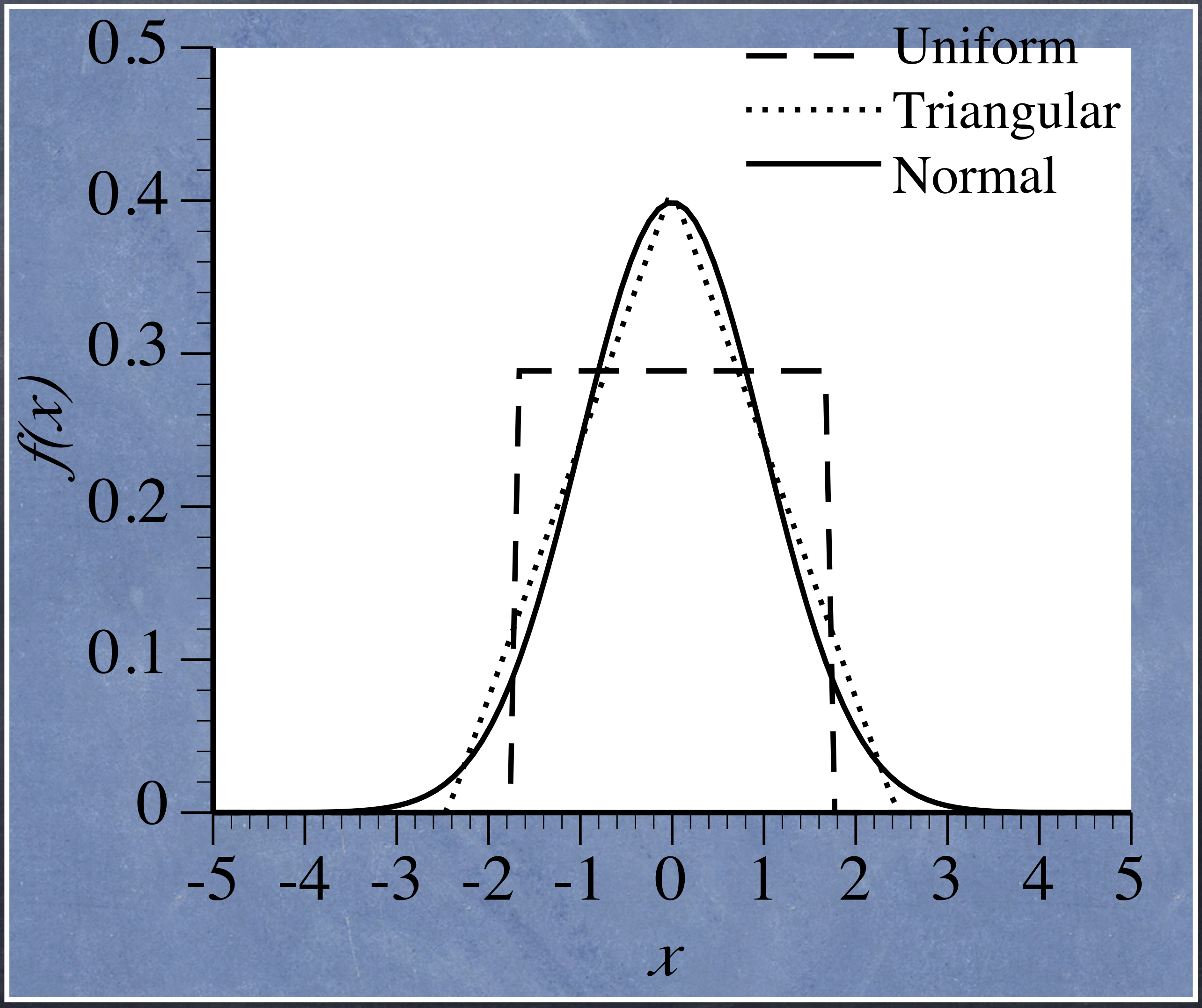
$$y_n = y_{n-1} + f_{n-1}^y$$

正規乱数による
シミュレーション

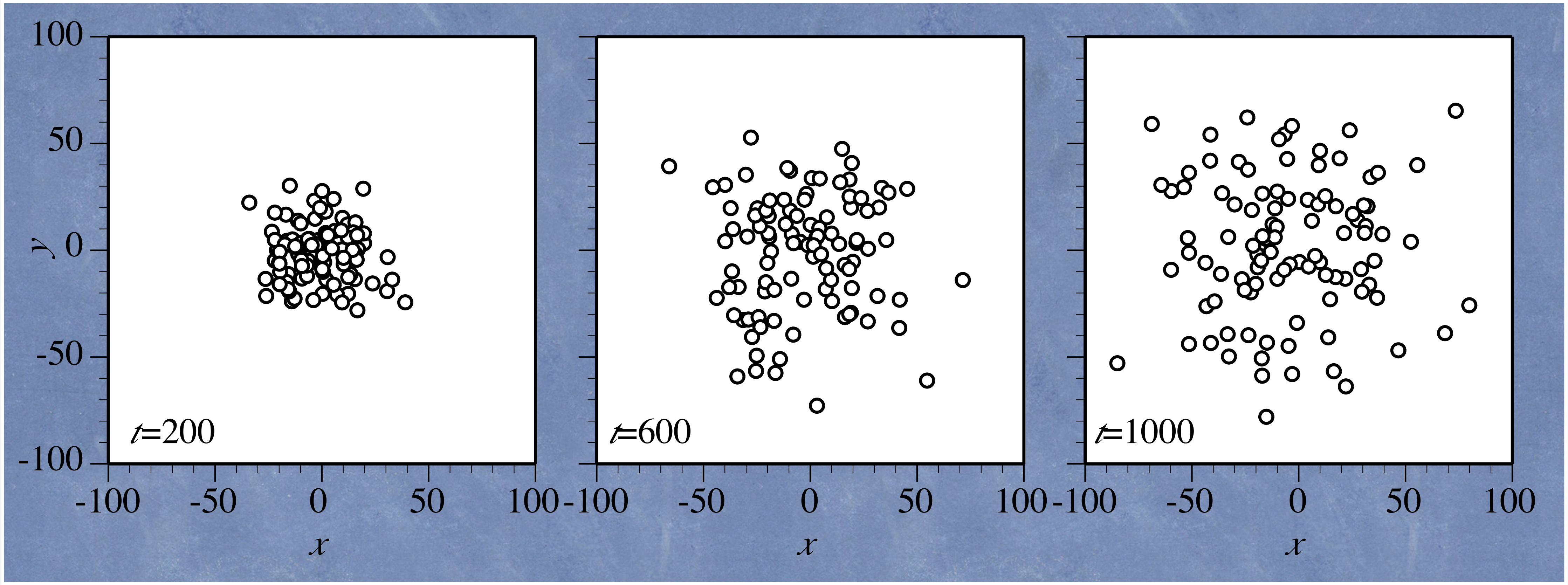


ブラウン運動

- 平均0と分散1をそろえた一様乱数、三角乱数、正規乱数によるシミュレーション
- １万個の粒子を考慮

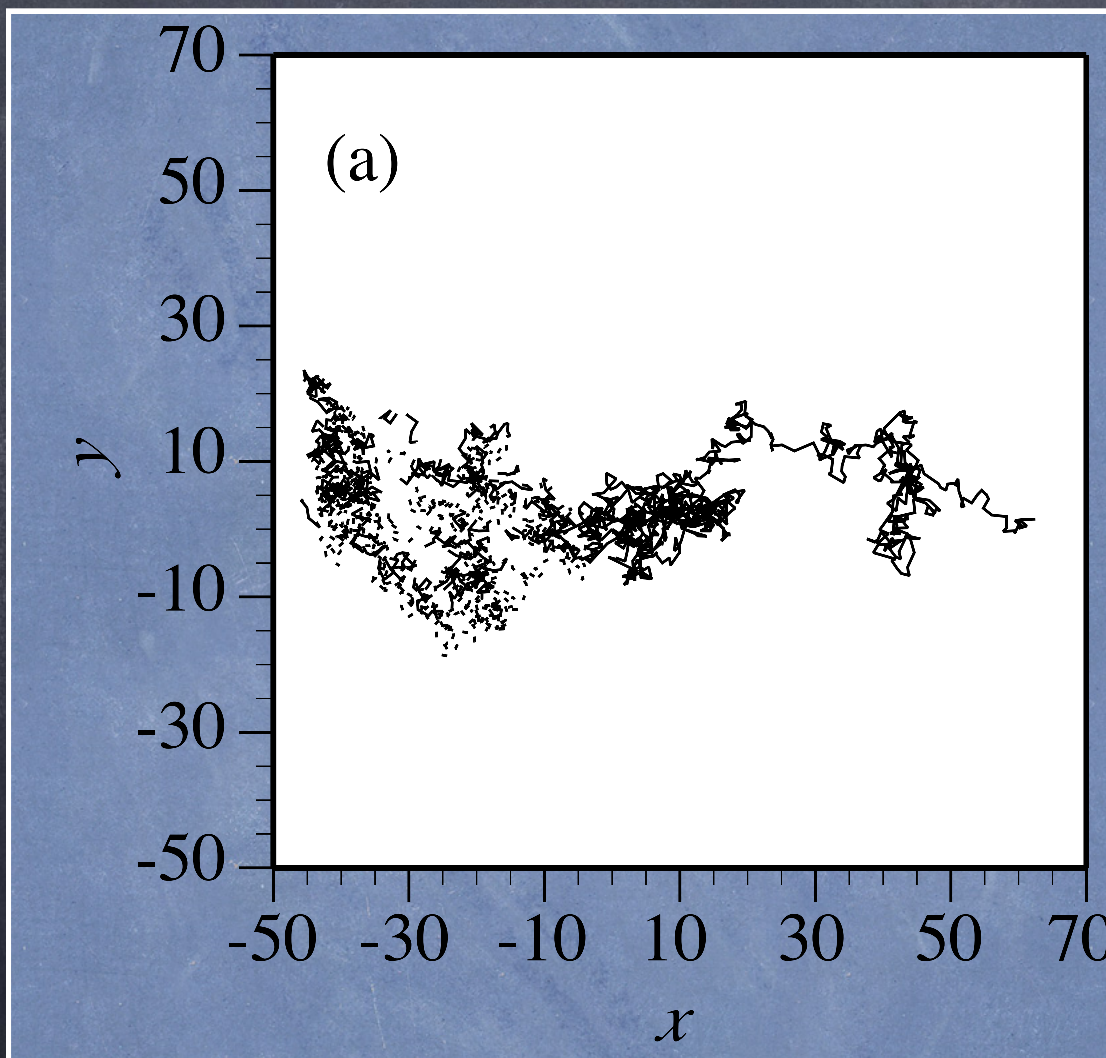


正規乱数での粒子結果

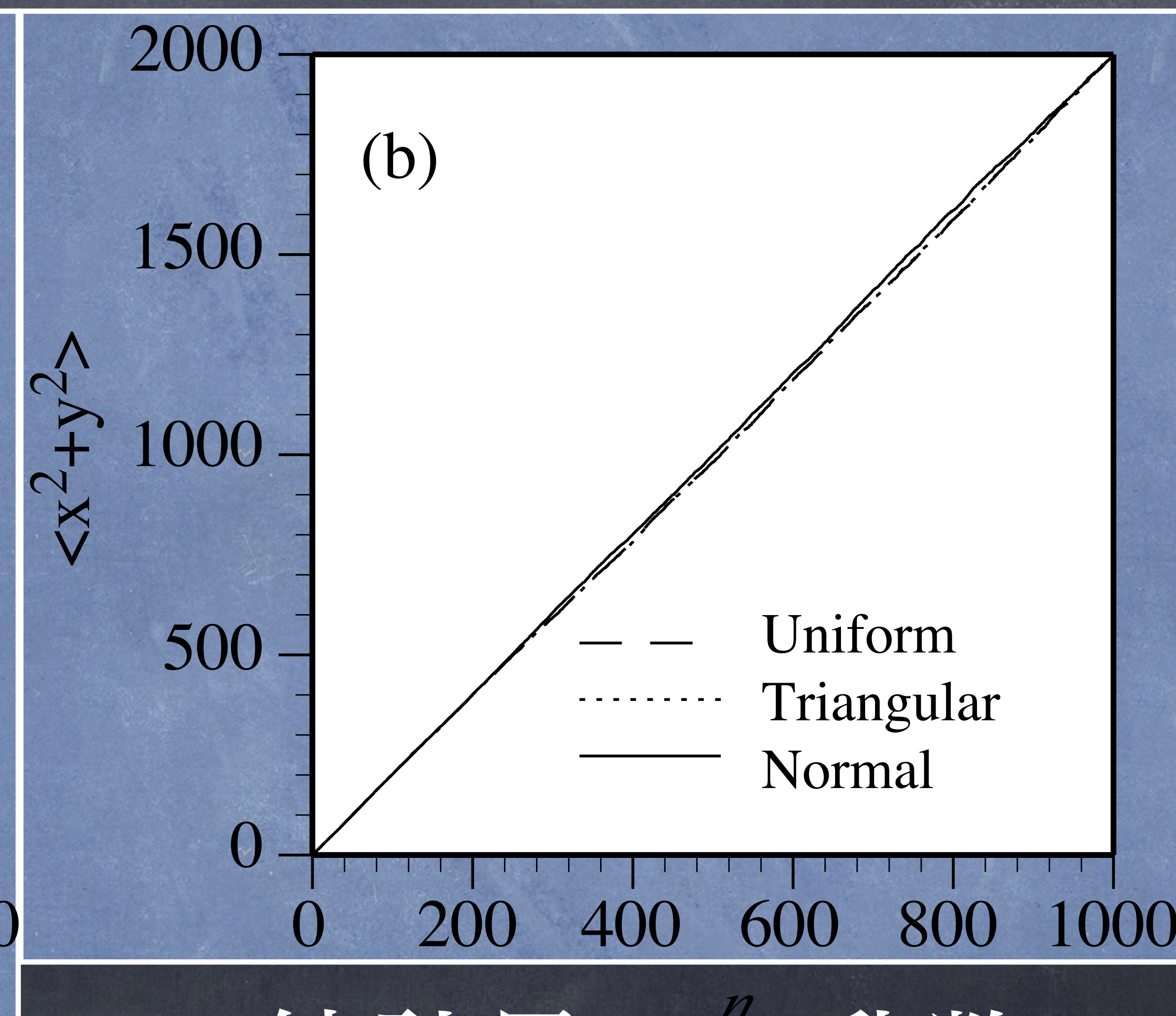


計算結果

1 粒子軌跡



移動距離の 2 乗平均



統計量には乱数の
違いが表れない

ブラウン運動のまとめ.1

- 最終的には単純な拡散問題（数密度）

$$\frac{\partial \rho(x,y,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,y,t)}{\partial x^2} + D\frac{\partial^2 \rho(x,y,t)}{\partial y^2}$$

- 拡散係数は分散により決まるので、確率密度関数のその他の性質に依存しない。

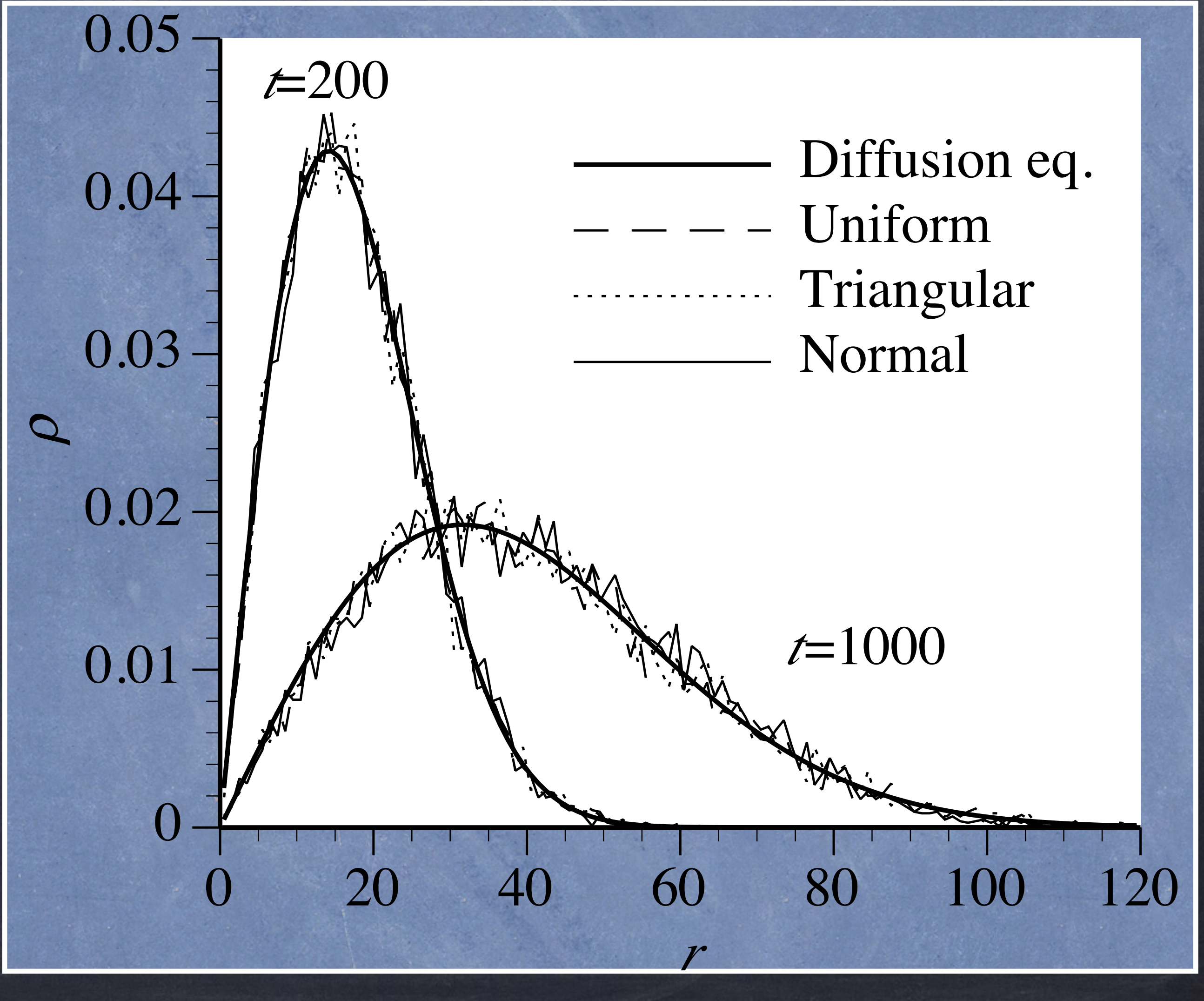
$$D = \frac{\sigma^2}{2t}$$

ブラウン運動のまとめ.2

- 解 $$\rho(x,y,t)=\frac{1}{4\pi Dt}\exp\left(-\frac{x^2+y^2}{4Dt}\right)$$

レイリー分布

$$\rho(r,t)=\frac{r}{2Dt}\exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right)$$



その他の乱数利用例.1

- 確率モデルのシミュレーション
- 　（コイン振り）
- 　（サイコロ振り）
- 　（ビンゴゲーム）
- 　（おつりの準備）
- 　（ギャンブルの期待値）などなど

その他の乱数利用例.2

- モンテカルロシミュレーション（数値積分）

次の積分を実行してみましょう！

$$S = \int_0^1 dx \sqrt{1 - x^2} = \frac{\pi}{4}$$

二つの検討方法

x＝０〜１、y＝０〜１の空間を考える。

ケース１

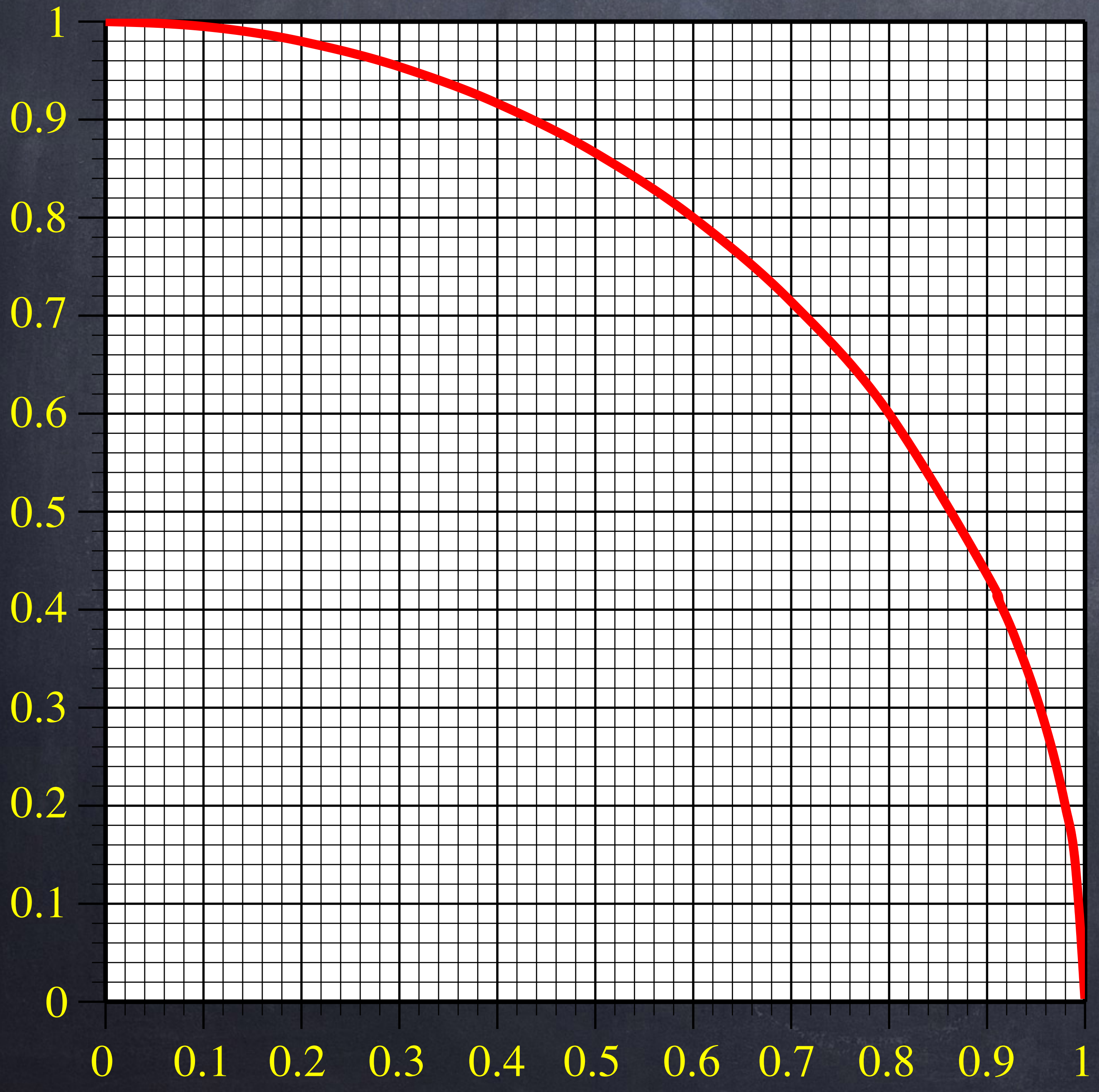
正方形グリッドをきって積分内に何個はいっているかをカウントする。

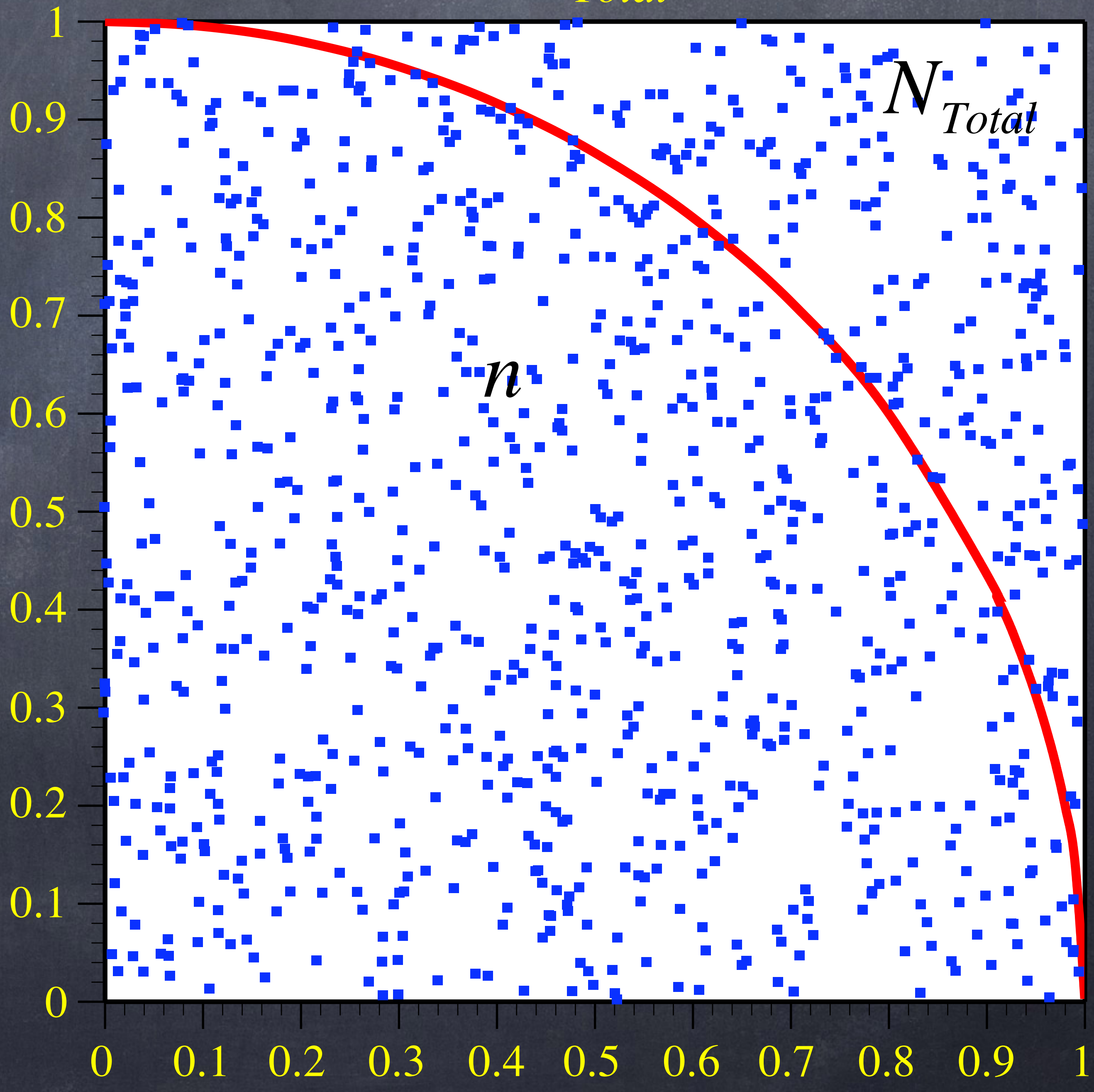
ケース２

一様乱数により２次元面内の点を発生させて積分内に何個いるかをカウントする。

シミュレーション結果例

$$S = \frac{n}{N_{Total}} \times 1$$





結果

ある程度の乱数点数を発生させれば解析値に非常に近くなっている。

楕円体への適用結果

$$\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}+\frac{z^2}{c^2}=1 \qquad V=\frac{4\pi}{3}abc$$