環境科学計算機実験

担当：高須 夫悟

takasu@es.nara-wu.ac.jp

- 擬似乱数の生成と応用
- 4月20日、4月27日の 2回
- レポートで成績を評価する

現象のモデル化

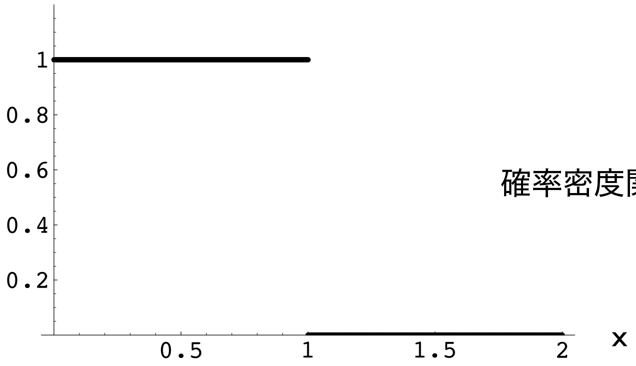
- 多くの自然現象は、数理モデル、として記述できる
- 物体の自由落下、電気回路、放射性物質の崩壊、化学反応、生物集団の増減などは微分方程式で記述できる（初期値を決めれば振る舞いが一意に決まる<u>決定論的モデル</u>）
- 自然界には確率的に起こる現象がある（<u>確率論的モデル</u>）
- 確率論的モデルを実装するために乱数の生成が必要
- 乱数にもいろいろある。最も基本的なものが一様乱数

一様乱数

- 区間 [a, b) で一様な乱数 X を考える。X は a から b の値を同じ確からしさで取る確率変数

$$\mathrm{Prob}[x < X < x + dx] = \begin{cases} \frac{1}{b-a}dx & a \le x < b \\ 0 & \mathrm{Otherwise} \end{cases}$$

a = 0, b = 1 の場合



確率密度関数はステップ関数

一様乱数

- 区間 [0, 1) で一様な乱数 U[0, 1) から任意の一様乱数を生成可能

$$U[0,1) \times a = U[0,a)$$

$$U[0,1) + b = U[b, 1+b)$$

- どうやって U[0, 1) を生成するか？

擬似乱数の生成

- 擬似乱数をソフトウェア的に生成するアルゴリズムには幾つかある

線形合同法

$$X_{i+1} = (A \times X_i + B) \mod M$$

適当な整数値定数 A, B, M ($M > A, M > B, A > 0, B > 0$) を用いて、$X_0$ を乱数の種 seed として逐次乱数列 X_i を生成する方法

最大値は $M - 1$、周期は最大で M

線形合同法

- 初期値 X_0 を与える漸化式に他ならない
- A, B, M をうまく選ぶとそれなりの質の擬似乱数が生成されるか？

```
#define IA   3877
#define IB   29573
#define IM   139968 // 周期！

int main (int argc, const char * argv[]) {

   int i, randomInt;
   double randomDouble;

   randomInt = 10;

   for(i=0; i<3000; i++){
       randomInt = (randomInt*IA + IB) % IM;
       randomDouble = (double)randomInt/IM;
   }

   return 0;
}
```

疑似乱数の質

- 線形合同法で生成された乱数 [0, 1) はどの程度良質か？
- 擬似乱数列 $\{X_0, X_1, X_2, \ldots\}$ を、1次元、2次元、3次元上の点として描画してみる
- プログラムで生成した疑似乱数列をファイルに書き出し、Mathematica で読み込んで可視化する

```
% ./a.out > data
```

リダイレクションを用いて出力をファイルに保存

```
SetDirectory["~/kkkj/takasu/"];
```

Mathematica で読み込むファイルがあるディレクトリを設定

2018 (H30) 奈良女子大学理学部　環境科学コース　環境科学計算機実験

データの可視化

```
data = ReadList["data", Real];
```

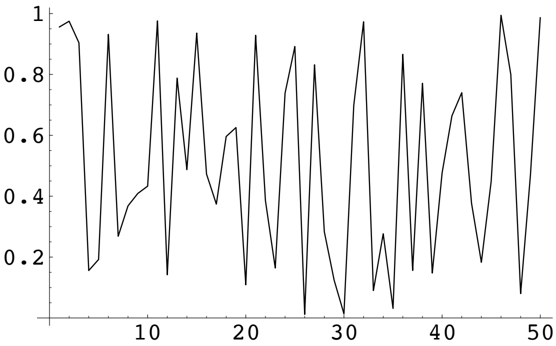
ファイル data から数値を読み込む

```
data = ReadList["data", {Real, Real}];
```

ファイル data から数値を2つペアで読み込む

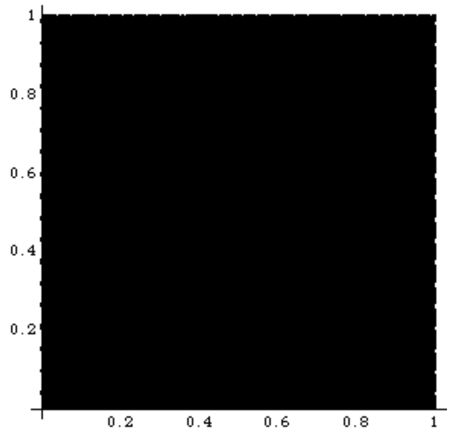
ListPlot コマンドで視覚化

```
ListPlot[Take[data, -50], PlotJoined → True]
```

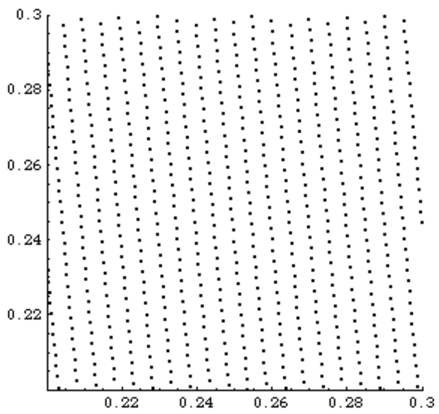


- Graphics -

```
ListPlot[data, AspectRatio -> 1]
```

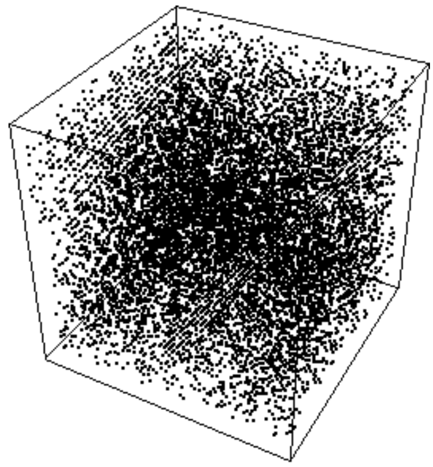


```
data = ReadList["data", {Real, Real}];
ListPlot[data, AspectRatio -> 1, PlotRange->{{0.2,0.3},{0.2,0.3}}]
```



拡大すると点 (Xn, Xn+1) が
規則的に配置

点 (Xn, Xn+1, Xn+2) が規則的に配置？



線形合同法は奨励できない

```
data = ReadList["data", {Real, Real, Real}];
seqPoint = Map[Point, data];
g = Show[Graphics3D[Take[seqPoint, -10000]]]
```


rand 関数

- 多くの C 言語処理系で実装される rand 関数は線形合同法により擬似乱数を生成

void srand(unsigned)
乱数の種（初期値）を指定

int rand(void)
擬似乱数を生成

```
#include <stdlib.h>
#include <time.h>

unsigned seed;
int randomInt;
double randomDouble;

seed = (unsigned)time(NULL);

srand(seed);
printf("RAND_MAX is %d\n", RAND_MAX);
printf("Seed is %d\n", seed);

for(i=0; i<3000; i++){
   randomInt = rand();
   randomDouble = randomInt/(RAND_MAX + 1.0);
   printf("%d, %f\n", randomInt, randomDouble);
}
```

メルセンヌ・ツイスタ

- より高品質な擬似乱数を生成する Mersenne Twister

void init_genrand(long)
乱数の種（初期値）を指定

double genrand_real2(void)
擬似乱数 [0, 1) を生成

両関数とも外部ファイルで定義されている

乱数の種を設定することに注意！

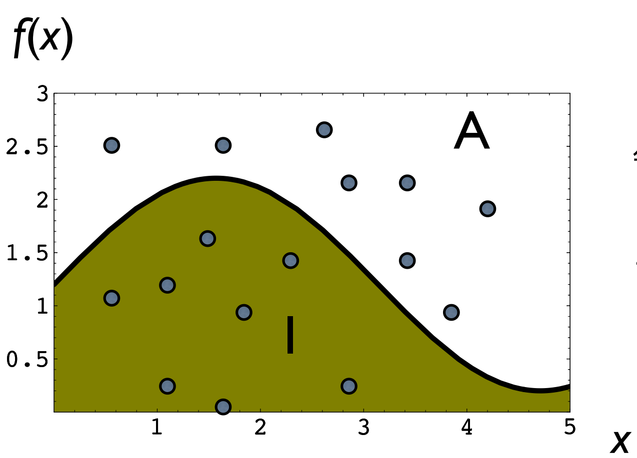
```
#include <stdio.h>
#include <time.h>

extern void init_genrand(long);
extern double genrand_real2(void);

long seed;
int i;
double rand;

seed = (long)time(NULL); // seed の設定

init_genrand(seed); // seed で初期化

for(j=0; j<3000; j++){
   rand = genrand_real2();
   printf("%.20f\n", rand);
}
```


モンテカルロ積分

- 乱数を用いた $f(x)$ の積分の計算

領域 A ($0 \le x \le 5, 0 \le y \le 3$) でランダムな点をとる。
積分 I は、ランダムな点が曲線 $f(x)$ の下側に落ちる割合と領域 A の面積の積で与えられる（と予想される）

$$I = \int_0^5 f(x)dx$$



領域 A でランダムな点をとるとは、領域 A 内のどの場所にも同じ確からしさで点を打つこと。

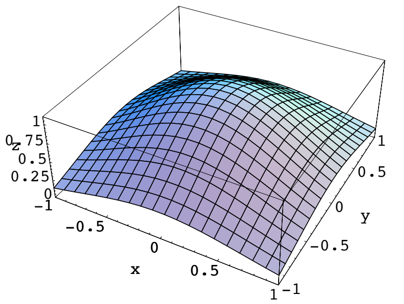
モンテカルロ積分の用途

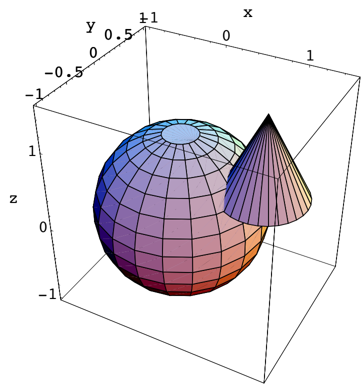
- 重積分など被積分関数 f の評価や積分範囲の数式表現が困難な場合に用いられるモンテカルロ積分
- 擬似乱数を用いて積分値の近似値を求めることができる

$$V = \iint_{\Omega} f(x, y)dxdy$$

$$\Omega : -1.5 \leq x, y \leq 1.5$$

被積分関数と積分領域の解析表示は困難





2018 (H30) 奈良女子大学理学部　環境科学コース　環境科学計算機実験

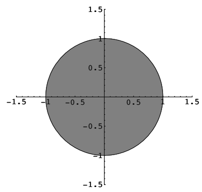
問題 1

- メルセンヌ・ツイスタを用いて、区間 [0, 1) の一様擬似乱数を N 個生成せよ
- [0, 1) を区間幅 0.1 で 10 個の区間に区切り、各区間に落ちた擬似乱数の数を数えてファイルに書き出せ
- 乱数が一様であれば、各区間に落ちる数の平均は N/10 と予想される。生成した擬似乱数が統計的に一様であるか、どのようにして判定したら良いか考えよ
- メルセンヌ・ツイスタにより生成した乱数列 $\{X_1, X_2, \ldots\}$ を 2次元もしくは 3次元上に描いて、視覚的に乱数の質を調べよ

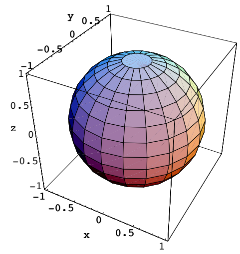
問題 2

- モンテカルロ法により以下の積分の近似値を求め、真の解と比較せよ

$$2\int_{-1}^{1}\sqrt{1-x^2}dx = \iint_{x^2+y^2\le 1} dxdy$$

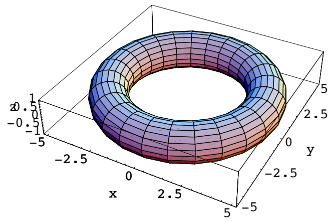


$$\iint_{x^2+y^2\le 1}\sqrt{1-x^2-y^2}dxdy = \iiint_{x^2+y^2+z^2\le 1} dxdydz$$



半径 1 の円を z 軸の周りで半径 4 で回転させて出来る
トーラスの体積

$$\iiint_{(\sqrt{x^2+y^2}-4)^2+z^2\le 1} dxdydz$$



2018 (H30) 奈良女子大学理学部　環境科学コース　環境科学計算機実験

問題 2 続き

- モンテカルロ法により以下の積分の近似値を求めよ

原点を中心とする半径 2 の球と、
(1, 0, 1) を中心とする半径 1 の球の
合成部分の体積