

データサイエンス系科目群（理・博）：シミュレーション実習 第3回 講義資料

担当：川崎猛史

名古屋大学大学院理学研究科理学専攻物理科学系・非平衡物理研究室 (R 研)

Last update: April 24, 2022

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化（Marsaglia polar 法）
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集（Unix 系および Windows）
- 7 参考文献

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法)
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows)
- 7 参考文献

1. 講義のスケジュール

- 当実習は春 1 期にて実施する.
- 講義資料は各講義**予定日当日朝 11 時迄**にアップロードする.
- スケジュール
 - 1 4/11 : 第 1 回
 - 2 4/18 : 第 2 回
 - 3 **4/25 : 第 3 回**
 - 4 5/02 : 第 4 回 (中間レポート課題公開)
 - 5 5/09 : 第 5 回
 - 6 5/16 : 第 6 回 (中間レポート課題提出期限予定)
 - 7 5/23 : **休講**
 - 8 5/30 : 第 7 回
 - 9 6/06 : 第 8 回 (期末レポート課題公開)
 - 10 6/13
 - 11 6/20 : (期末レポート課題提出期限予定)

1.1. シラバス

当実習では以下の内容を扱う予定である（進捗に合わせ変更する可能性がある）。

1 導入

- C(C++) の使い方 (主に数値計算)
- Python の使い方 (データ解析と作図)
- 数値計算の理念
- 桁落ち
- 科学計算における無次元化

2 常微分方程式の数値解法：減衰振動や調和振動子を例に

- 微分方程式の数値積分
- オイラー法
- 蛙飛び差分法（速度ベルレ法）
- 軌道の安定性と保存則

3 1 粒子系のブラウン運動

- ランジュバン方程式（確率微分方程式）
- 正規乱数の生成法
- オイラー・丸山法
- 時間平均とアンサンブル平均
- 拡散係数の計算

4 多粒子系のブラウン運動

- 相互作用力の計算方法
- 非平衡系のシミュレーション：相分離現象を例に

5 多粒子系の分子動力学シミュレーション

- 位置ベルレ法と速度ベルレ法
- 多粒子系における保存則（運動量・エネルギー・角運動量）

6 モンテカルロ法

- 統計力学の復習
- マルコフ連鎖モンテカルロ法
- メトロポリス判定法

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化（Marsaglia polar 法）
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集（Unix 系および Windows）
- 7 参考文献

2. 第2回自主課題解説

減衰運動の数値計算と解析計算の比較

1次元中を運動する溶媒中の粒子の運動を考える．この粒子の運動方程式は

$$m \frac{dv(t)}{dt} = -\zeta v(t),$$

であり，時刻 $t = 0$ において速度 $10a\zeta/m$ の速さで運動しているとする．この時，以下の各問に答えよ．なお，無次元化に際し，長さの単位は a ，時間の単位は $t_0 = m/\zeta$ とおくこと．

- (1) この微分運動方程式の解析解を求めよ．さらに問題文中にて指定した単位系を用いることで無次元化せよ．
- (2) この粒子の速度の時間発展を数値的に計算し解析解と比較せよ．ただし運動方程式の離散化は簡単のため Euler 法を用いるものとし，離散化における時間分解能を $\Delta t/t_0 = 0.1, 0.01, 0.001$ と変えたものを比較してみよ．

【解説】

2. 第2回自主課題解説 (2)

(1) 微分方程式の理論解は

$$v(t) = 10 \frac{a\zeta}{m} \exp(-t\zeta/m) \quad (1)$$

である．数値的に得られた解は無次元化されたものであるから，この理論解も無次元化してみよう．上式の両辺を $\frac{a\zeta}{m}$ で割ると，

$$v(t) \frac{m}{a\zeta} = 10 \exp(-t\zeta/m) \quad (2)$$

を得る．いま， $\tilde{v}(t) = v(t) \frac{m}{a\zeta}$ かつ $\tilde{t} = t\zeta/m$ であるので，上式は

$$\boxed{\tilde{v}(t) = 10 \exp(-\tilde{t})} \quad (3)$$

となり無次元化された．つまりこの解と数値計算の解を比較すればよい．

2. 第 2 回自主課題解説 (3)

- (2) 数値計算の主計算プログラムをリスト 1 に載せた"damping.cpp"。以下の GitHub リポジトリより取得可能。 [リンク](#)
- (ポイント) 前回学んだ計算機イプシロンの値より速度の値が小さくなった際に 0 とみなし終了するようにした。
 - (ポイント) 関数 (サブルーチン) に主な計算を押し込むことにより main 文は 4 行に抑えた。変数を関数内で初期化できるので便利。
 - 図示の python プログラムをリスト 2 "damping.py"にまとめた。先の GitHub リポジトリより取得可能。
 - 図示をする際に、for 文や if 文を駆使することで、前回より複数のグラフを並べる際にスリムなコードになった。

2. 第2回自主課題解説 (4)

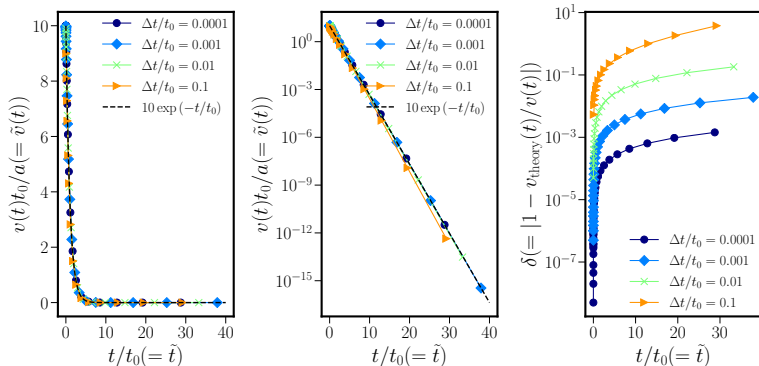


図 1: 時間刻み (時間分解能) を変化させた際の, (左) 無次元化速度の時間発展 (線形図), (中) 無次元化速度の時間発展 (片対数図), (右) 速度の誤差の時間発展.

- 以下, C(C++) を用いた計算プログラムである.

リスト 1: 第2回自主課題 主計算用サンプルプログラム “damping.cpp”. 以下の GitHub リポジトリより取得可能. [\[リンク\]](#)

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <stdlib.h>
3  #include <math.h>
4  #include <iostream>
5  #include <fstream>
6  #include <cfloat>
7  //using namespace std;
8
9  int damp(double dt){
10     char filename[128];
11     std::ofstream file;
12     int i=0;
13     double v=10., out=1.;
14     sprintf(filename, "velo_%.4f.dat", dt);
15     file.open(filename);
16     while(v > DBL_EPSILON){
17         v-=v*dt;
18         i++;
19         if((double)i >= out){
20             file << (double)i*dt << "    " << v <<std::endl;
21             std::cout << (double)i*dt << "    " << v <<std::endl;
22             out*=1.5;
23         }
24     }
25     file.close();
26     return 0;
```

```
27 }  
28  
29 int main(){  
30     double dt;  
31     for(dt=1.e-4; dt<=1.e-1; dt*=10.)  
32         damp(dt);  
33     return 0;  
34 }
```

- 以下、図示の際のサンプルプログラムである。

リスト 2: Python サンプルプログラム “velo_plot.py” GitHub リポジトリより取得可能。 [リンク](#) jupyter notebook ファイル “2022_simulation.ipynb”にも同等のプログラムを掲載。

```

1 import matplotlib
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 %matplotlib inline
4 %config InlineBackend.figure_format = 'retina'
5 import matplotlib.cm as cm # colormap
6 import numpy as np
7 plt.rcParams["text.usetex"] = True
8 fig = plt.figure(figsize=(18,8))
9
10 dt=[0.0001,0.0010,0.0100,0.1000]
11 symbol =['o-', 'D-', 'x-', '>-']
12
13 for j in range (1,4):
14     plt.subplot("13{}".format(j))
15     ax1 = fig.add_subplot("13{}".format(j))
16     if(j>1):
17         plt.yscale('log')
18
19     for i in range (0,4):
20         print(i,symbol[i],dt[i]) # for check on the arrays
21         time,vel= np.loadtxt("./Documents/GitHub/2022-simulation-
22                               training-main/Lecture3/velo_{:.4f}.dat".format(dt[i]),
23                               comments='#', unpack=True)
24
25         if(j!=3):
26             plt.plot(time,vel, "{}".format(symbol[i]), markersize

```

```

=10,color=cm.jet(i/4),label=r"$\Delta t/t_0={}$".
format(dt[i]))
24     else:
25         plt.plot(time,np.abs(1 -10.*np.exp(-time)/vel), "{}".
            format(symbol[i]),markersize=10,color=cm.jet(i/4),
            label=r"$\Delta t/t_0={}$".format(dt[i]))
26
27
28     ###Drawing a line #####
29     if(j<3):
30         time= np.linspace(1e-4, 4e1, 1000)
31         vel= 10.*np.exp(-time)
32         plt.plot(time,vel, "--",markersize=3,linewidth = 2.0, color=
            "k",label=r"$10\exp\{-t/t_0\}$")
33     #####図の書式設定
34     #
35     plt.tick_params(which='major',width = 1, length = 10)
36     plt.tick_params(which='minor',width = 1, length = 5)
37     ax1.spines['top'].set_linewidth(3)
38     ax1.spines['bottom'].set_linewidth(3)
39     ax1.spines['left'].set_linewidth(3)
40     ax1.spines['right'].set_linewidth(3)
41     plt.xlabel(r"$t/t_0(=\tilde{t})$",color='k', size=30)
42     if(j!=3):
43         plt.ylabel(r"$v(t)t_0/a(=\tilde{v}(t))$",color='k', size=30)
44     else:
45         plt.ylabel(r"$\delta(=|1-v_{\rm theory}(t)/v(t)|)$",color='k',
            size=30)
46
47     plt.xticks(color='k', size=25)
48     plt.yticks(color='k', size=25) 図の凡例の有無や位置, サイズを調整

```

```
49     #
50     if(j<3):
51         plt.legend(ncol=1, loc=1, borderaxespad=0, fontsize=20,
                    frameon=False)
52     else:
53         plt.legend(ncol=1, loc=4, borderaxespad=0, fontsize=20,
                    frameon=False)
54
55     #####
56     #図のマージン設定
57     plt.subplots_adjust(wspace=0.5, hspace=0.25)
58     #各自ファイルのパスを変えること.
59     plt.savefig('./Documents/GitHub/2022-simulation-training-main/
60                 Lecture3/velo_dt_lin_log.png')
61     plt.savefig('./Documents/GitHub/2022-simulation-training-main/
62                 Lecture3/velo_dt_lin_log.pdf')
63     plt.show()
```

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動 (1 粒子)
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法: 次回解説する
 - Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法)
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows)
- 7 参考文献

3.Langevin 方程式で駆動される粒子の運動 (1 粒子)

ここでは、分子動力学計算の熱浴としてもっともよく使われるものの一つである、Langevin 熱浴と、これにより駆動される粒子の運動について考える。今回は、主に理論解について導出する [1](R. Zwanzig, Nonequilibrium Statistical Mechanics (Oxford University Press, Oxford;New York,2001)).

3.1. Langevin 方程式と揺動散逸定理

- 抵抗係数 ζ の温度 T の溶媒 (熱浴) 中を運動する質量 m の球のブラウン運動は、以下の Langevin 方程式

$$m \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = -\zeta \mathbf{v}(t) + \mathbf{F}_B(t) \quad (4)$$

によって、モデル化することが出来る。

- ここで、熱揺動力 $\mathbf{F}_B(t)$ は、白色ノイズ (2 時刻時間相関関数が時間に関する delta 関数) であり

$$\langle \mathbf{F}_B(t) \mathbf{F}_B(t') \rangle = B \delta(t - t') \mathbf{1} \quad (5)$$

を満たすとする。ここで、 $\mathbf{1}$ は単位行列であり、また、 $\mathbf{F}_B(t)$ は中心極限定理から、分散が $\sqrt{B\delta(t-t')}$ の正規分布 (Gauss 分布) を示す。

- 以下、温度 T の熱浴中を運動する粒子の性質から相関係数 B の値を求める。

3.1. Langevin 方程式と揺動散逸定理 (2)

- 古典平衡統計力学によればエネルギー等分配則より, d を空間次元とすれば

$$\langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{dk_B T}{m} \quad (6)$$

である (古典 Maxwell Boltzmann 分布を参照). ここで k_B はボルツマン定数である. ボルツマン定数と気体定数 R の関係は, n をモル数, N を粒子数とすると, $nR = Nk_B$ である.

- 式 (4) を定数変化法より解けば, 速度ベクトルは

$$\mathbf{v}(t) = \frac{1}{m} \int_{-\infty}^t dt' \mathbf{F}_B(t') e^{-\gamma(t-t')} \quad (7)$$

である. ここでは簡単のために, $\zeta = m\gamma$ とおいた.

3.1. Langevin 方程式と揺動散逸定理 (3)

- すると速度ベクトルの 2 乗平均は、二重積分の形で表すと、

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 \langle \mathbf{F}_B(t_1) \cdot \mathbf{F}_B(t_2) \rangle e^{-\gamma(t-t_1)} e^{-\gamma(t-t_2)} \\
 &= \frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^t dt_2 dB \delta(t_1 - t_2) e^{-\gamma(2t-t_1-t_2)} \\
 &= \frac{1}{m^2} \int_{-\infty}^t dt_1 dB e^{-2\gamma(t-t_1)} \\
 &= \frac{1}{m^2} \int_0^\infty dt' dB e^{-2\gamma t'} \\
 &= \frac{Bd}{2m^2\gamma}
 \end{aligned} \tag{8}$$

となる。

- いま $\langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{dk_B T}{m}$ であるので $m\gamma = \zeta$ に注意することで、 B の値が

$$B = 2\zeta k_B T \tag{9}$$

と決まる。

3.1. Langevin 方程式と揺動散逸定理 (4)

- これより，熱揺動力の相関関数は，

$$\langle \mathbf{F}_B(t) \mathbf{F}_B(t') \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t - t') \mathbf{1} \quad (10)$$

を満たすことがわかる．このような熱平衡系において揺動力（ノイズ）と散逸（インピーダンス）のバランスを表す関係を

(第 2 種) 揺動散逸定理 (2'nd fluctuation-dissipation theorem: FDT) という．

3.2. 速度相関関数

次に, Langevin 熱浴中を運動する粒子の速度相関関数を理論的に求める. (拡散過程を考える上で重要)

- Langevin 方程式の両辺に $\mathbf{v}(0)$ の内積をとり, 平均を取ると

$$m \frac{d \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle}{dt} = -\zeta \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle + \langle \mathbf{F}_B(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle \quad (11)$$

である. いま, 時刻 t の力と時刻 0 の速度は相関がないので, 右辺第 2 項は落ちる. ここで速度相関関数を $C(t) = \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle$ とすれば,

$$\boxed{m \frac{dC(t)}{dt} = -\zeta C(t)} \quad (12)$$

となるので $C(t)$ は, 単なる減衰型の微分方程式で表される. いま, $t > 0$ であるとすれば,

$$C(t) = C(0)e^{-\gamma t} \quad (13)$$

を得る. また相関関数の性質から, 時間並進対称性¹をもつことから

$$\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \langle \mathbf{v}(t-t) \cdot \mathbf{v}(-t) \rangle = \langle \mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{v}(-t) \rangle \quad (14)$$

を得る. このことから, $t' = -t$ (負の値) とすると

$$C(t') = C(0)e^{\gamma t'} \quad (15)$$

となる.

3.2. 速度相関関数 (2)

- $C(0) = \frac{dk_B T}{m}$ であることに注意して、一般の t に対してこれらの結果をまとめると

$$C(t) = \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \frac{dk_B T}{m} e^{-\gamma|t|} \quad (16)$$

となる． また、定常状態においては時間並進対称性が相関関数において成り立つので

$$C(t_1 - t_2) = \langle \mathbf{v}(t_1) \cdot \mathbf{v}(t_2) \rangle = \frac{dk_B T}{m} e^{-\gamma|t_1 - t_2|} \quad (17)$$

を得る．

¹2 時刻から等しい時間ずらしても値は変わらないという性質

3.3. 平均二乗変位

次に, Langevin 熱浴中を運動する粒子の短時間挙動と長時間挙動を理論的に考察する.
特に長時間極限においては拡散挙動が観測される.

- 平均二乗変位は

$$\langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))^2 \rangle \rightarrow 2dDt \quad (t \rightarrow \infty) \quad (18)$$

となる. ここで D を **拡散係数** という.

- いま Langevin 方程式の解からこのような振る舞いが再現されることを示す. また短時間挙動についても同時に示す.
- 変位 $\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)$ は $\mathbf{v}(t)$ を積分することで

$$\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0) = \int_0^t dt' \mathbf{v}(t') \quad (19)$$

となる. このことから, 平均二乗変位は, 二重積分形式で書けば

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0))^2 \rangle &= \langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \rangle = \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \langle \mathbf{v}(t_1) \cdot \mathbf{v}(t_2) \rangle \\ &= \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \frac{dk_B T}{m} e^{-\gamma|t_1 - t_2|} \end{aligned} \quad (20)$$

3.3. 平均二乗変位 (2)

いま, 全積分領域を $t_1 > t_2$ と $t_1 < t_2$ に分割する. この時積分の値は対称性から等しい. 従って, $t_1 > t_2$ の場合に絞って, 全体を 2 倍することで帳尻を合わせる. すると,

$$\begin{aligned}
 \langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \rangle &= \frac{2dk_{\text{B}}T}{m} \int_0^t dt_2 \int_{t_2}^t dt_1 e^{-\gamma(t_1-t_2)} \\
 &= \frac{-2dk_{\text{B}}T}{m\gamma} \int_0^t dt_2 \{ (e^{-\gamma(t-t_2)} - 1) \} \\
 &= \frac{2dk_{\text{B}}T}{m\gamma} \left\{ t + \frac{1}{\gamma} e^{-\gamma t} - \frac{1}{\gamma} \right\}
 \end{aligned} \tag{21}$$

となる.

- ここで, 平均二乗変位の長時間および短時間挙動について考察する.

3.3. 平均二乗変位 (3)

- **長時間:** $t \gg \gamma = 1/\gamma = m/\xi$ とすることで, 式 (21) は, 指数関数や定数項が落ち, t 線形項のみがこのころなので

$$\langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \rangle \sim \frac{2dk_{\text{B}}T}{m\gamma} t = \frac{2dk_{\text{B}}T}{\xi} t \equiv 2Dt \quad (22)$$

となる. これより, 長時間では拡散挙動を示すことがわかる. また, 関係式

$$D = \frac{k_{\text{B}}T}{\xi} \quad (23)$$

を得る. これを Einstein の関係式 とよぶ.

- **短時間:** $t \ll \gamma = 1/\gamma = m/\xi$ とすることで, 指数関数項をマクローリン展開すると $e^{-\gamma t} \sim 1 - \gamma t + \frac{1}{2}\gamma^2 t^2$ であるので, これを式 (21) に代入すると,

$$\langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \rangle \sim \frac{2dk_{\text{B}}T}{m} t^2 \quad (24)$$

となる. このように短時間では t^2 の挙動 (弾道軌道) を示す. また, 等分配則から平均速度は $\langle \mathbf{v}(t)^2 \rangle = \frac{2dk_{\text{B}}T}{m}$ であるので, $\langle \Delta \mathbf{r}(t)^2 \rangle \sim \langle (\mathbf{v}(t)t)^2 \rangle$ から, 速度 $\langle \mathbf{v}(t) \rangle$ の等速直線運動であることがわかる.

3.4. 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式

ここまで、熱平衡系あるいは、弱い非平衡系における相関関数や輸送係数の関係について議論した。ここでは、速度相関関数と拡散係数の関係を考える。

- 速度相関関数 $\langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \frac{k_B T}{m} e^{-\gamma|t|}$ を以下の通り時間積分すると

$$\int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle = \frac{dk_B T}{\gamma m} = \frac{dk_B T}{\xi} = dD \quad (25)$$

となる。このことから、拡散係数は、

$$D = \frac{1}{d} \int_0^\infty dt \langle \mathbf{v}(t) \cdot \mathbf{v}(0) \rangle \quad (26)$$

と表される。この議論は、熱伝導や電気伝導など様々な系に拡張することが可能であり、一般的に、このような、熱平衡系を保障する相関関数と輸送係数のバランス関係式を 第 1 種揺動散逸定理 という。また グリーン・久保公式²[2, 3] ともよぶ。

²弱い外場に対する摂動を議論する線形応答理論

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第2回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第1種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第3回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化（Marsaglia polar 法）
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集（Unix 系および Windows）
- 7 参考文献

4. 第3回自主課題

減衰運動の数値計算と解析計算の比較（続き）

- (1) 第2回自主課題の主計算から作図まで全て python でコーディングしてみよ.
python の文法については, 検索すればすぐに情報を取得できるが, 例えば以下のサイトなどを参照せよ [\[リンク\]](#) [4].
- (2) (発展課題) 次回は Langevin 方程式によって駆動される粒子の運動を数値的に解く.
その際に, 正規乱数を発生させる必要がある. **余力があれば** 正規乱数を発生させるアルゴリズム (Box Muller 法) を以下に示すのでこれを解読せよ [次回解説する].
- (3) (発展課題) リスト 3 に示したサンプルプログラム "BM.h" は, 分散 1 平均 0 の正規分布を満たす乱数を生成する. 今, この乱数を 10^5 回生成したとき, 確率変数の度数分布 (ヒストグラム) を描け [次回解説する].

4.1. (参考資料) Box Muller 法：次回解説する

分散 1 の正規 R_G を計算で発生させる方法として Box Muller 法 [5] が有名である。

Box Muller 法

U_1 と U_2 を $[0, 1]$ の範囲で分布する一様乱数とすると、以下の X_1 と X_2 は独立な標準 (分散 1 の) 正規分布となる。

$$X_1 = \sqrt{-2\log U_1} \cos 2\pi U_2 \quad (27)$$

$$X_2 = \sqrt{-2\log U_1} \sin 2\pi U_2 \quad (28)$$

(参考文献) G.E.P. Box and M.E. Muller, The Annals of Math. Stat. (1958).

リスト 3: 正規乱数の発生アルゴリズム (Box-Muller 法) 以下のプログラム "BM.h" はサブルーチンとして移植するかヘッダとして include せよ。

```
1 double unif_rand(double left, double right)
2 {
3     return left + (right - left)*rand()/RAND_MAX;
4 }
5
6 double gaussian_rand(void)
7 {
8     static double iset = 0;
9     static double gset;
```

4.1. (参考資料) Box Muller 法：次回解説する (2)

```
10 double fac, rsq, v1, v2;
11
12 if (iset == 0) {
13     do {
14         v1 = unif_rand(-1, 1);
15         v2 = unif_rand(-1, 1);
16         rsq = v1*v1 + v2*v2;
17     } while (rsq >= 1.0 || rsq == 0.0);
18     fac = sqrt(-2.0*log(rsq)/rsq);
19
20     gset = v1*fac;
21     iset = 0.50;
22     return v2*fac;
23 } else {
24     iset = 0;
25     return gset;
26 }
27 }
```

(証明)

- 式 (27) and (28) を連立することで u_1, u_2 について解く。

4.1. (参考資料) Box Muller 法：次回解説する (3)

- まず X_1 と X_2 の 2 乗を取ることで以下の関係式

$$\begin{aligned}\log U_1 &= -\frac{X_1^2 + X_2^2}{2} \\ U_1 &= e^{-\frac{X_1^2 + X_2^2}{2}},\end{aligned}$$

を得る.

- 式 (27) を式 (28) で割ることで

$$\begin{aligned}\frac{X_2}{X_1} &= \tan 2\pi U_2 \\ U_2 &= \frac{1}{2\pi} \arctan \frac{X_2}{X_1}.\end{aligned}$$

を得る.

- これらを用いることで X_1 と X_2 が独立なガウス過程であることを示す.
- いま確率密度関数 $P(X_1, X_2)$ と $\tilde{P}(U_1, U_2)$ を導入する.

4.1. (参考資料) Box Muller 法：次回解説する (4)

- $P(X_1, X_2)$ と $\tilde{P}(U_1, U_2)$ の関係は,

$$P(X_1, X_2)dX_1dX_2 = \tilde{P}(U_1, U_2)dU_1dU_2 = \tilde{P}(U_1, U_2) \left| \frac{\partial(U_1, U_2)}{\partial(X_1, X_2)} \right| dX_1dX_2.$$

となる.

- U_1 と U_2 は独立な $[0, 1]$ を閾値にもつ一様乱数であることから

$$\int_0^1 dU_1 \int_0^1 dU_2 \tilde{P}(U_1, U_2) = 1,$$

となり $\tilde{P}(U_1, U_2) = 1$ を得る.

- いま, これらのヤコビアン $\left| \frac{\partial(U_1, U_2)}{\partial(X_1, X_2)} \right|$ は

$$\left| \frac{\partial(U_1, U_2)}{\partial(X_1, X_2)} \right| = \begin{vmatrix} \frac{\partial U_1}{\partial X_1} & \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \\ \frac{\partial U_1}{\partial X_2} & \frac{\partial U_2}{\partial X_2} \end{vmatrix} = \left| \frac{\partial U_1}{\partial X_1} \frac{\partial U_2}{\partial X_2} - \frac{\partial U_2}{\partial X_1} \frac{\partial U_1}{\partial X_2} \right|.$$

4.1. (参考資料) Box Muller 法：次回解説する (5)

- となるので、適宜微分を実行すれば

$$\frac{\partial(U_1, U_2)}{\partial(X_1, X_2)} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\frac{X_1^2+X_2^2}{2}}}{1 + (\frac{X_2}{X_1})^2} & -\frac{1}{2\pi} \frac{X_2^2}{X_1^2} \frac{e^{-\frac{X_1^2+X_2^2}{2}}}{1 + (\frac{X_2}{X_1})^2} \\ \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\frac{X_1^2+X_2^2}{2}}}{1 + (\frac{X_2}{X_1})^2} & \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\frac{X_1^2+X_2^2}{2}}}{1 + (\frac{X_2}{X_1})^2} \end{vmatrix} = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{X_1^2+X_2^2}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{X_1^2}{2}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{X_2^2}{2}}.$$

を得る。従って、 $P(X_1, X_2) = p(X_1)p(X_2)$ であるので X_1 と X_2 は、独立なガウス過程であることが示された。

$y = \arctan x$ の微分

From $x = \tan y$, $\frac{dx}{dy} = \frac{1}{\cos^2 y}$, and then

$$\frac{dy}{dx} = \cos^2 y = \frac{1}{1 + \tan^2 y} = \frac{1}{1 + x^2}$$

is obtained.

4.2. Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法)

- Box Muller 法における，三角関数の計算は比較的重い計算であり，大量に乱数を発生させる際は大きなコストとなる．
- ここでは，計算方法を工夫することで，三角関数を直接計算せずに Box Muller 法と同等の結果を得る方法を紹介する (Marsaglia polar 法)．

Implementation procedure for the efficient Box Muller method

1

$$\mathbf{R} = (u_1, u_2),$$

を導入する． u_1, u_2 は， $[-1, 1]$ を閾値にもつ一様乱数とする．ここでは， \mathbf{R} を適当にふり，半径 1 の円の中に入った乱数のペアのみ抜き出す（外に出たものは棄却）．

2

するところで得た $R^2 = u_1^2 + u_2^2$ は $[0, 1]$ を閾値にもつ一様乱数である (証明を下に載せた)．そのため $U_1 = R^2$ としてよく， $\sqrt{-2 \log U_1}$ を得る．

3

次に \mathbf{R} の偏角も一様に分布することから

$$\frac{u_1}{R} = \cos 2\pi U_2$$

$$\frac{u_2}{R} = \sin 2\pi U_2$$

してよく，三角関数に一様乱数を引数として与えたものと同等の結果が得られる．

4.2. Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法) (2)

(2 の証明)

$X = R^2$ とすると確率密度関数 $f(X)$ を R に関する確率密度関数 $g(R)$ との関係は

$$f(X)dX = g(R)dR = g(R)\frac{\partial R}{\partial X}dX.$$

となる。いま, $g(R)$ は R に比例³するので $g(R) = CR$ である。従って以下の積分を実行することで

$$\int_0^1 g(R)dR = \left[\frac{C}{2} R^2 \right]_0^1 = \frac{C}{2} = 1.$$

より $C = 2$ となる。このことから, $\frac{\partial R}{\partial X} = \frac{1}{2R}$ となり

$$f(X)dX = \frac{2R}{2R}dX = 1dX.$$

を得る。いま, $f(X) = 1$ より R^2 は $[0, 1]$ を閾値とする一様乱数であることが示された。

³円環に分割した際, 微小区間の面積は R に比例する

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法)
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows)
- 7 参考文献

5.1. オイラー法の収束性の評価

■ 減衰型の微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x \quad (29)$$

は、オイラー法で離散化すると

$$x_{n+1} = (1 + \lambda \Delta t)x_n \quad (30)$$

とかけます。この時、数列の収束条件は

$$|x_{n+1}/x_n| = |1 + \lambda \Delta t| < 1 \quad (31)$$

ですので、

$$\Delta t < -1/\lambda \quad (32)$$

を満たす Δt を選べば数値計算は安定に回る。

- ここでは $\lambda = -1$ なら $\Delta t < 1$ で安定。
- しかしそれだけでは十分でなく Δt を変化させた時の誤差の程度も議論するのが一般的である。
- 収束値からのずれはオイラー法の場合 $O(\Delta t)$ で系統的に変化する。
- 見たい現象がどの程度誤差に寛容であるかに応じて時間刻み Δt 変化させる必要がある。

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化（Marsaglia polar 法）
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集（Unix 系および Windows）
- 7 参考文献

6.1. 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows)

端末上で用いるコマンドについて、纏めて欲しいというリクエストがあったので、以下に示す。

■ Unix 環境よく使うコマンド [6]

リスト 4: Unix 環境よく使うコマンド：

```
1
2  pwd  現在ディレクトリのフルパス表示
3  cd   ディレクトリ移動
4  cd/  ホームディレクトリ移動
5  mkdir 新規ディレクトリを作成
6  rm -r 指定ディレクトリを中のファイルごと削除
7  cp -r (dirA) (dirB)  ディレクトリのコピー
8  mv (file) (dir)  ファイルをディレクトリへ移動
9  ls   現在ディレクトリのファイル一覧表示
10 cat (file)  ファイルの内容表示
11 rm (file)  ファイルを削除
12 cp (fileA) (fileB)  ファイルコピー
13 mv (fileA) (fileB)  ファイル名変更
14 touch (file)  空のファイルを作成
15 find (dir)  指定ディレクトリ以下のファイルを列挙
16 more (file)  ファイルの内容表示 (ページごとに止まる)
17 diff (fileA) (fileB)  ファイル間の差分 (変更点) を表示
18 history コマンドの履歴リストを表示
```


6.1. 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows) (2)

■ Windows 環境よく使うコマンド [7]:

リスト 5: Windows 環境よく使うコマンド:

```
1  dir  現在ディレクトリのファイル一覧表示
2  cd   ディレクトリへ移動
3  mkdir フォルダの作成
4  del(file) ファイル削除
5  ren  (fileA) (fileB)   ファイル名変更
6  copy (fileA) (fileB)   ファイル名コピー
7  move (fileA) (fileB/dirC) ファイルの移動、もしくはディレクトリ名の変更
8  type テキストファイルの内容を表示する。
9  find ファイル内やコマンドの出力結果に含まれる文字列を検索する。
10 where ファイルの場所を表示する
```

目次

- 1 講義のスケジュール
 - シラバス
- 2 第 2 回自主課題解説
- 3 Langevin 方程式で駆動される粒子の運動（1 粒子）
 - Langevin 方程式と揺動散逸定理
 - 速度相関関数
 - 平均二乗変位
 - 第 1 種揺動散逸定理とグリーン・久保公式
- 4 第 3 回自主課題
 - (参考資料) Box Muller 法：次回解説する
 - Box Muller method の高速化 (Marsaglia polar 法)
- 5 付録 1
 - オイラー法の収束性の評価
- 6 付録 2
 - 端末上でよく使うコマンド集 (Unix 系および Windows)
- 7 参考文献

参考文献・ウェブサイト

- [1] Zwanzig R (2001) Nonequilibrium Statistical Mechanics.
(Oxford University Press, Oxford ; New York).
- [2] Green MS (1954) Markoff Random Processes and the Statistical Mechanics of Time-Dependent Phenomena. II. Irreversible Processes in Fluids.
The Journal of Chemical Physics 22(3):398–413.
- [3] Kubo R (1957) Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems.
Journal of the Physical Society of Japan 12(6):570–586.
- [4] AIAcademy (2022) 【Python 入門】無料で Python の基本文法を 5 時間で学ぼう！
(<https://aiacademy.jp/media/?p=265>).
- [5] Box GEP, Muller ME (1958) A Note on the Generation of Random Normal Deviates.
The Annals of Mathematical Statistics 29(2):610–611.
- [6] Omori T (2021) UNIX コマンド集 (<http://www.ritsumei.ac.jp/~tomori/unix.html>).
- [7] ITSakura (2020) Windows コマンドプロンプトのコマンド一覧 — ITSakura
(<https://itsakura.com/windows-command>).