

ポテンシャル法による乱数の検定

筑波大学 電子・情報工学系

三好和憲 (Kazu-nori Miyoshi)

§ 1 はじめに

電子計算機を用いてシミュレーションを行う際に、必要な「乱数」は算術的な演算によって得られる擬似乱数に頼ることが多い。擬似乱数は算術的な定ったアルゴリズムで生成される故独立性に欠けるのは当然であるが、特に乗算合同法の格子構造^[1]は多次元空間を扱うシミュレーションでは極めて有害である。いま乱数の列を粒子の3次元座標に割り付けたとき(各粒子は等しい質量をもった質点とする)、粒子系の2体相関によるポテンシャルエネルギーと2体分布相関関数は、この格子構造に鋭敏な randomness を表わす指標として用いることができる。

§ 2 ポテンシャルエネルギー

3次元空間を一边 $2L$ の立方体を基本とする周期構造から成るものとし、基本立方体の中に N 個の粒子を配する。

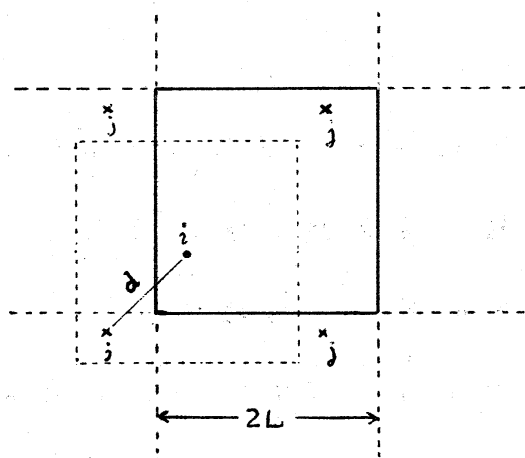
3次元空間を考えるのは，物理量が直観的であることと，格子構造を検出するには一応十分な次元であることによる。

$N = (2L)^3$ とおき粒子の平均数密度を1に規格化すると，無次元化された2体相関によるポテンシャルエネルギーは，基本立方体あたり

$$\begin{aligned}
 U_N &= -\frac{3}{4\pi} \int_{\substack{\nu = (2L)^3 \\ \nu = (2L)^3}} \frac{\left\{ \sum_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) - 1 \right\} \left\{ \sum_j \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}_j) - 1 \right\}}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \\
 &= -\frac{3}{4\pi} \left(\sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} - 2 \sum_{i=1}^N \int \frac{d\mathbf{x}}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}|} + \nu \int \frac{d\mathbf{x}}{|\mathbf{x}|} \right) \\
 &= -\frac{3}{4\pi} \left(\sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} - NL^2 \int_{-1}^1 \int \int \frac{dx dy dz}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right) \\
 &= -\frac{3}{4\pi} \left[\sum_{i \neq j}^N \sum_{j=1}^N \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} - NL^2 \{ 12 \log(2 + \sqrt{3}) - 2\pi \} \right] \\
 &= -\frac{3}{2\pi} \sum_{i > j}^N \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|} - \frac{6 \log(2 + \sqrt{3}) - \pi}{4L} \right\} \dots \textcircled{1}
 \end{aligned}$$

と書ける。^[2] (係数 $\frac{3}{4\pi}$ には数学的な意味は無いが，平坦な膨張宇宙で comoving frame の運動エネルギーの係数を $\frac{1}{2}$ に規格化したときこの値を得る)

表式①の計算において $|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|$ は周期構造を考慮し Fig. 1 に示す如く最短の pair により計算する。即ち常に着目した粒子を中心に基本立方体を考えていることになり，無限の空間を有限な構造に分割しつつ空間の一様性を保証している。



```

el2 = 2 * dl * el ... 2L
do 10 m = 1, 3
  S(m) = x(m, i) - x(m, j)
  if (S(m).ge.el) S(m) = S(m) - el2
  if (S(m).lt.-el) S(m) = S(m) + el2
10 continue
d = dsqrt (S(1)**2 + S(2)**2 +
           S(3)**2)

```

Fig. 1

§ 3 相関函数

2体分布相関函数 $g(x)$ は粒子の数密度を $n(x)$ として

$$g(x_1 - x_2) = \frac{\langle \{n(x_1) - \langle n \rangle\} \{n(x_2) - \langle n \rangle\} \rangle}{\langle n \rangle^2} - \frac{\delta(x_1 - x_2)}{\langle n \rangle} \quad \dots (2)$$

と書かれる。^[3] この意味するところは、 $\langle n \rangle g(x_1 - x_2)$ は x_1 に存在する粒子により x_2 に付加的に誘起される粒子数密度であり、 $g(x)$ は $|x_i - x_j|$ の分布から求められる。

$|x_i - x_j|$ が $x - \Delta x$ と x との間にある pair ($i-j$ と $j-i$ とダブって数える) の個数を $G_{\Delta x}(x)$ 、 $\Delta V = \frac{4}{3}\pi \{x^3 - (x - \Delta x)^3\}$ とすると $\langle n \rangle = 1$ であるから

$$g(x) \approx \frac{G_{\Delta x}(x)}{N \Delta V} - \frac{N-1}{N} \quad (x \leq L) \quad \dots (3)$$

を得る。区間 Δx は $G_{\Delta x}(x) \gg 1$ を満足する条件の下にできるだけ小さく取るものとする。

§ 4 分散

素性の良い乱数を用いて作られた粒子系では式①のポテンシャルエネルギーと式③の相関函数とは何れも零になることが期待される。ポテンシャルエネルギーの分散について、筑波大学電情工学系の小柳義夫博士より、ポテンシャル積分の体積を立方体ではなく球にすれば解析的に求められるとの指摘を受けた。

$$\sigma^2\left(\frac{1}{r}\right) = \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle - \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle^2 = \frac{\int_V \frac{dv}{r^2}}{\int_V dv} - \left(\frac{\int_V \frac{dv}{r}}{\int_V dv} \right)^2 \quad \dots \textcircled{4}$$

において $V = \{x, y, z \mid x^2 + y^2 + z^2 \leq L^2\}$ とすると $\sigma^2\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{3}{4L^2}$ を得る。球の場合のポテンシャルエネルギーを

$$U_s = -\frac{\pi}{3} \sum_{\substack{i>j \\ |x_i - x_j| < L}} \left\{ \frac{1}{|x_i - x_j|} - \frac{3}{2L} \right\} \quad \dots \textcircled{5}$$

で計算すると ($|x_i - x_j|$ の計算には常に着目した粒子を中心に基本立方体を考えることは同様である) 体積 V 中に含まれる粒子数のばらつきによる分散は無視でき

$$\begin{aligned} \sigma^2(U_s) &= \left(\frac{\pi}{3}\right)^2 \cdot \frac{N(N-1)}{2} \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi L^3}{(2L)^3} \sigma^2\left(\frac{1}{r}\right) \\ &\doteq \frac{4}{9} \pi^3 L^4 \quad \dots \textcircled{6} \end{aligned}$$

と書かれる。しかしながら実際の粒子系のポテンシャルの分散は⑥式と必ずしも一致せず、 $N \rightarrow \infty$ では⑥式は過大な

値を与える。基本立方体による周期構造と、等方な空間である球とは整合しないようである。

積分の体積が立方体の場合は

$$\sigma^2\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{3}{L^2} \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x^2+1}} \arctan \frac{1}{\sqrt{x^2+1}} - \left[\frac{1}{4L} \{ 6 \log(2+\sqrt{3}) - \pi \} \right]^2$$

$$\doteq 0.50233899 \times \frac{1}{L^2} \quad \text{より}$$

$$\sigma^2(U_N) = \left(\frac{3}{2\pi}\right)^2 \cdot \frac{N(N-1)}{2} \cdot \sigma^2\left(\frac{1}{r}\right) \doteq (1.9143 \times L^2)^2 \quad \dots \textcircled{7}$$

を得る。

§5 検定結果

乗算合同法の3つの乗数について、ポテンシャルエネルギーと相関函数とを計算した。また乱数の原器として円周率の値の小数部分を十進8桁ずつ区切ったものを参照に用い、ポテンシャルエネルギーの最大値（最小値は存在しない）を単純格子により求めた。単純格子の場合は周期構造を配慮すると粒子数 N を整数の3乗にとる必要があるが、偶数の3乗の場合（ある粒子に着目したときこの粒子を中心とする基本周期境界上に格子点が並ぶ）と奇数の3乗の場合（周期境界が格子点の間になる）とで異なり、 N が偶数の3乗の場合 $U_N \approx 0.90 N$ 、奇数の3乗の場合 $U_N \approx 0.53 N$ を与える。粒子数 N は格子構造を検出するため、また統計量で

ある相関函数を精度よく求めるためには、できるだけ大きく
 とる必要があるが、計算時間が N の自乗に比例する (IAP を
 使わないとき) ので $N \sim 10^4$ が限度である。乱数の有効
 桁数が少ないときは衝突を避けるためやはり N を大きくはと
 れない。(例えば $N = 15625$ で、 $\pi - 3$ と + 進る桁ずつ
 区切って乱数とした場合、衝突の確率は 0.115 である。
 実際 42 例のうち 5 例で衝突が起っている) $N = 8^3, 10^3,$
 $12^3, 16^3, 25^3$ の場合についてポテンシャルエネルギーの値
 をまとめた結果を Table 1 に示す。

[MEAN VALUE AND STANDARD DEVIATION OF THE POTENTIAL ENERGY]						
number of particles	energy of simple lattice and expected st'd deviation	pi - 3 8 digits per number	mod 2**31: multiplier = 5**11	mod 2**31: multiplier = 12**16 + 31	mod 2**31: multiplier = 23	mod 2**31: multiplier = 23
512	437.756 +- 30.629	-0.5914 +-34.4938	-1.787 +-26.569	-64.29 +- 48.47	-370.02 +-1581.58	162smpl's
1000	869.678 +- 47.858	-9.0366 +-46.1944	-14.85 +-47.63	-206.38 +- 90.53	-734.76 +-1487.85	183samples
1728	1519.62 +- 68.92	-8.250 +-63.681	-14.931 +-73.187	-489.64 +-102.04	-2489.87 +-3482.10	148samples
4096	3651.61 +- 122.52	-39.15 +-116.90	-31.49 +-145.61	-2184.65 +-185.11	-7704.7 +-3926.0	120samples
15625	8275.57 +- 299.11	-38.28 +-275.13	-66.18 +-267.57	-20467.9 +- 308.9	-69739.3 +-6775.0	15 samples

Table 1

円周率の値から得た粒子系は、平均値・標準偏差共に理論値に非常に近い値を与えている。乗算合同法の場合、悪名高い乗数である $2^{16}+3 = 65539$ と現在も人気がある $5^{11} = 48828125$ との違いは明白である。乗数 5^{11} と円周率との間には、きりした差は見られないが、分散の理論値からの外れは 5^{11} の場合にやや大きいようである。

相関函数 $g(x)$ の値は③式で $\Delta x = 0.1$ ととり、 $x \sim \frac{L}{2}$ 近傍での振舞を見ると、例として $N = 4096$ の場合

i) 乗数が 23, 65539 の場合 $3 \leq x \leq 5$ で $x^2 g(x)$ の最大値、最小値を与える x の値は一定しており、最大値・最小値は共に $|x^2 g(x)| \sim 3$

ii) 20 例について $\pi - 3$ と乗数 5^{11} とを比較すると Table 2

	$\pi - 3$	乗数 5^{11}
Min $x^2 g(x)$ $3 \leq x \leq 5$	-0.1651 ± 0.0526	-0.1613 ± 0.0540
Max $x^2 g(x)$ $3 \leq x \leq 5$	0.1462 ± 0.0365	0.1546 ± 0.0428

Table 2

の如くで、有意の差は無い。ただ $\text{Min } x^2 g(x)$ の分布の形は $\pi - 3$ では鋭いピークと広いスロープとから成るのに対し 5^{11} では全体に平坦な分布を示している点異なる。

§ 6 結論

よい乱数、標準的な乱数の基準は明確ではないが、乱数列

により3次元粒子系を構成した場合，直観的な物理量であるポテンシャルエネルギーが零となるものを一つの標準乱数と考えるならば，円周率の十進数字の列はよい標準乱数を与える。ポテンシャル法は粒子数 N を大きくしたとき計算時間が増大する難点があるが，格子構造の検出に有効といえる。また小さな N で多くの標本を得， U_N の分布の適合度検定を行うのも有用であろう。

参考文献

- [1] Marsaglia, G.: Random numbers fall mainly on the planes, Proc. Nat. Acad. Sci., Vol.61, pp.25-28 (1968).
- [2] Miyoshi, K. and Kihara, T.: Development of the Correlation of Galaxies in an Expanding Universe, Publ. Astron. Soc. Japan, Vol.27, pp.333-346 (1975)
- [3] Landau, L.D. and Lifshitz, E.M.: Statistical Physics, 2nd. ed. Pergamon Press, London (1968)