

# 「モデリングとシミュレーション実験」課題2

締切:2016/12/19

## 1 酔歩の Mastert 方程式

講義では、原点  $x = 0$  から出発した多数の粒子が、ある時刻  $t$  にどの位置にいるかの頻度を考えた。これを別の観点から見直してみよう。各粒子がどこへ移動するかを追うのではなく、各位置に居る確率の時間変化を記述することにする。これを Master 方程式と呼ぶ。

時刻  $t$  にある位置  $x$  に居る粒子は確率  $\rho$  で  $x + 1$  へ、 $1 - \rho$  で  $x - 1$  へ移動するとする。粒子は、時刻  $t = 0$  に位置  $x = 0$  にだけ存在するとする。ある位置  $x$  に時刻  $t$  に居る確率  $q(x, t)$  は、 $x - 1$  から移動してくる確率と  $x + 1$  から移動してくる確率の和で表される。

$$q(x, t) = \rho \times q(x - 1, t - 1) + (1 - \rho) \times q(x + 1, t - 1) \quad (1.1)$$

この時間発展方程式 (Master 方程式) を追えば、各時刻にある位置に居る確率を評価できるはずである。

課題1  $t = 0$  で  $q(0, 0) = 1$ 、及び  $q(x, 0) = 0 (x > 0)$  とする。つまり、すべての粒子は  $x = 0$  から出発するとする。このとき、 $t = 1, 2, 3$  のとき、 $q(x, t)$  のゼロでない要素を  $\rho$  を用いて示しなさい。

## 2 クラス設計

酔歩の Master 方程式によってある位置に粒子が居る確率の時間変化を追うクラスを作ろう。RandomWalk プロジェクトの中に、masterEquation パッケージを作成し、その下に MasterEquation クラスを作ろう。

このクラスの中で、各位置に粒子が居る確率を保持するために、double  $q[]$  を持たせることにする。配列はあらかじめ大きさを定める必要がある。酔歩では、時刻  $t$  では、粒子は  $-t$  から  $t$  の範囲内に居る。そこで、あらかじめ時間更新の最大値  $n$  を決めておけば、配列  $q$  のサイズを  $2n + 1$  とすれば十分であることが分かる。

$t = 0$  では、 $x = 0$  のみに存在する。これに対応して、 $q[n]$  が 1 であり、他の  $q$  の要素はゼロとなる。次の時刻では、

$$q(-1, 1) = \rho q(-2, 0) + (1 - \rho) q(0, 0) = (1 - \rho) q(0, 0) \quad (2.1)$$

$$q(1, 1) = \rho q(0, 0) + (1 - \rho) q(2, 0) = \rho q(0, 0) \quad (2.2)$$

より、 $q[n-1]$  の値は  $1 - \rho$ 、 $q[n+1]$  の値は  $\rho$ 、他の  $q$  の要素はゼロとなる。

## 課題2 クラス MasterEquation にフィールド

```
private final double rho;  
private final double q[];  
private final int n;
```

を定義するとともに、 $\rho$  と  $n$  を引数とするコンストラクタを定義しなさい。コンストラクタ内では、配列  $q$  も生成する必要があります。

配列サイズを有限としたため、端の処理が必要となる。端は  $q[0]$  と  $q[2*n]$  である。 $q[0]$  には  $q[1]$  からのみ、確率が流れ込み、 $q[2*n]$  には  $q[2*n-1]$  からのみ流れ込んでくるとする。

プログラムを作成する上ではもう一つ注意が必要となる。ある時刻  $t$  での配列  $q$  から次の時刻  $t + 1$  での配列を直接作ってはいけないということである。例えば

```
q[0]=(1-rho)*q[1];
```

の次に

```
q[1]=rho*q[0]+(1-rho)*q[2];
```

を実行してしまうと、 $q[1]$  を計算する際の  $q[0]$  には、時刻  $t + 1$  の値が入っているからである。そのようなことを避けるために、 $q$  と同じサイズの配列  $qq[]$  に計算結果を一旦格納し

```
qq[i]=rho*q[i-1]+(1-rho)*q[i+1];
```

すべてのインデクスに対して計算が終わったのちに、配列  $qq$  の内容を  $q$  へコピーする。

## 課題3 時間を一つ進めて、 $q$ を更新するメソッド

```
private void update()
```

及び、更新を  $n$  回行い、その時の  $q$  を返すメソッド

```
public double[] evolution()
```

を定義しなさい。

### 3 計算の実行

クラスの定義が終わったので、最後に実行しよう。

課題4 クラス `MasterEquation` の `main()` メソッドで、 $\rho = 0.3$  及び  $n = 3$  として、実行し、配列 `q` の中身を印刷しなさい。その結果を課題1と比較しなさい。また、 $n = 4$  でも実行し、予想した結果と比較しなさい。その際に、初期の粒子の位置に相当するインデクスにも注意しなさい。また、 $n$  が奇数であるときには、中心の位置から奇数番目だけがゼロでなく、 $n$  が偶数であるときには、中心の位置から偶数番目だけがゼロでないことにも注目しなさい。

課題5 次に、 $n$  を大きな値、例えば 100000 にして実行しなさい。実行結果はファイルに書き出します。位置については、中心が 0 になるように注意すること。また、`q[i]` が 0 より大きい部分だけを出力すること。出力結果を図示し、正規分布になっていることを確認すること。

### 4 レポート提出

レポートは以下のように記載し、締切日の実験の開始時に提出すること。

- A4 用紙片面に印刷して提出すること。最初のページの上部に学籍番号と氏名を記載すること。ホチキスで左上を綴じること。
- 課題に沿って、内容を記載すること。ただし、単に課題の答えを記載するだけでは不十分である。課題の記述・理解、方法なども課題に前後して記載することで、レポートそのもので問題設定から解決までが読み取れる形式とすること。
- 「考察」として、レポートを通じて得たことを記載すること。
- 正しい日本語または英語で記述すること。Word や  $\text{\LaTeX}$  などを使って、適切に組版すること。図も入れ込むこと。単なるテキストファイルの印刷は受け付けない。
- 作成したプログラム及び `gnuplot` スクリプトも提出すること。プログラムは、レポートの Word や  $\text{\LaTeX}$  などとともに組版しても良いし、単独で印刷しても良い。
- 他人のプログラム、レポートを写したと判断される場合には、0点とする。