ランダムウォーク

みそ

2004.12.7

1 理論

乱数を利用する問題で、もっとも知られた問題はランダムウォークである。物体がジグザグにどっちに行くかわからない運動である。日本語では酔っ払いの千鳥足にちなんで酔歩とも呼ばれる。

これをプログラミングでシミュレーションするのは簡単で、すぐにできる。まず、方眼紙のような x 軸または y 軸に平行な線が等間隔に書かれた２次元座標をイメージしてもらいたい。そして、ある粒子は、それぞれの線が交わる点のみにとどまることができるとする。運動は上か下か左か右かの４方向のみとする。今この粒子はどちらの方向に行くのかわからない。この運動を再現するのに乱数を使う。例えば、まず 0〜1 の乱数を発生させて、0〜0.25 の場合上へ、0.25〜0.5 の場合下へというふうに粒子を距離１ずつ動かす。これを繰り返せばランダムウォークが見れる。乱数の発生の仕方を変えながらこれを繰り返し、粒子の最初の位置からの距離を統計的に見ると、ある一定値に近づく。これを調べるためにもこの問題を解析的に解いてみる。

平面上の点に番号をふり、n 回動いたときの座標 (i,j) における粒子の存在確率を P_n とすると、一点に存在する粒子はその点からの４方向のどれかからきたわけだから、以下の式、

$$P_{n+1} = \frac{1}{4}(P_n(i+1,j) + P_n(i-1,j) + P_n(i,j+1) + P_n(i,j-1)) \quad (1)$$

が成り立つことがわかる。変形して、

$$\begin{aligned} P_{n+1}(i,j) - P_n(i,j) &= \frac{1}{4}(P_n(i+1,j) + P_n(i-1,j) - 2P_n(i,j) \\ &\quad + P_n(i,j+1) + P_n(i,j-1) - 2P_n(i,j)) \quad (2) \end{aligned}$$

とする。ここで、座標の平行線の間隔を x 軸 y 軸それぞれ Δx、Δy とし、座標 x,y を $x = i\Delta x$、$y = j\Delta y$ とする。n 回動いたときの時刻を t とし、回数の時間の感覚を Δt とする。そうして、$P_n(i,j)$ を $P(x,y,t)$ と表すとする。ここで、テイラー展開より次のように近似を行う。

$$\begin{aligned} P(x,y,t+\Delta t) &= P(x,y,t) + \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial t}\Delta t \\ P(x \pm \Delta x,y,t) &= P(x,y,t) \pm \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P(x,y,t)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 \\ P(x,y \pm \Delta y,t) &= P(x,y,t) \pm \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial y}\Delta y + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 P(x,y,t)}{\partial y^2}(\Delta y)^2 \end{aligned}$$

これらの式より、

$$\begin{aligned} P(x,y,t+\Delta t) - P(x,y,t) &= \frac{\partial P(x,y,t)}{\partial t}\Delta t \\ P(x+\Delta x,y,t) + P(x-\Delta x,y,t) - 2P(x,y,t) &= \frac{\partial^2 P(x,y,t)}{\partial x^2}(\Delta x)^2 \\ P(x,y+\Delta y,t) + P(x,y-\Delta y,t) - 2P(x,y,t) &= \frac{\partial^2 P(x,y,t)}{\partial y^2}(\Delta y)^2 \end{aligned}$$

これらの式を式（2）に入れれば、

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t}\Delta t &= \frac{1}{4}(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}(\Delta y)^2) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= \kappa(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}) \qquad (3) \end{aligned}$$

となる。ただし、$\Delta x = \Delta y = \Delta s$ として、$\kappa = \frac{(\Delta s)^2}{4\Delta t}$ である。この形は偏微分方程式でよく出てくる拡散方程式である。この式の解を求めるのだが、初期条件と境界条件を決めておく必要がある。初期条件として、粒子は時刻 0 で原点にいるとし、境界条件として無限遠で粒子の存在確率は 0 であるとする。まず、変数分離法を用いて、

$$P(x,y,t) = T(t)U(x,y)$$

とする。これを式（3）に入れて、

$$UT' = \kappa T(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2})$$

変形して、

$$\frac{T'}{\kappa T} = \frac{1}{U}(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2})$$

この式は左辺は t にのみ依存していて、右辺は x,y に依存している。よって、この式が成り立つためには、両辺が定数でなければならない。この定数を k として、

$$\begin{aligned} T' - k\kappa T &= 0 \quad (4) \\ \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - kU &= 0 \quad (5) \end{aligned}$$

さらに式（5）で $U(x, y) = X(x)Y(y)$ と変数分離して、

$$YX'' + XY'' - kXY = 0$$

$$\frac{1}{X}X'' + \frac{1}{Y}Y'' - k = 0$$

$$\frac{1}{X}X'' = -\frac{1}{Y}Y'' + k$$

この式も先と同様の理由により両辺を定数 d とおいて、

$$\begin{aligned} X'' &= dX \quad (6) \\ Y'' &= (k - d)Y \quad (7) \end{aligned}$$

式（6）から解く。$d > 0$ とすると一般解は、

$$X = Ae^{\sqrt{d}x} + Be^{-\sqrt{d}x}$$

となるが境界条件から $x \to \pm\infty$ で $X \to 0$ とならなければならないから、これを満たすためには $A = B = 0$ となり、粒子の存在確率が 0 になり物理的に意味がない。$d = 0$ のときも同様になり物理的に意味がなくなる。よって、$d = -p^2 < 0$ のとき一般解は、

$$X = Ae^{ipx} + Be^{-ipx}$$

となる。式（7）を解く。$d = -p^2$ にして、

$$Y'' = (k + p^2)$$

$$Y'' = -q^2 Y$$

ただし、$-q^2 = (k + p^2) < 0$ である。一般解は、

$$Y = Ce^{iqy} + De^{-iqy}$$

である。式（4）を解く。$k = -(p^2 + q^2)$ だから、

$$T' = -\kappa(p^2 + q^2)T$$

一般解は、

$$T = Ee^{-\kappa(p^2+q^2)t}$$

である。よって、一般解 P は、定数 AE, BE, CE, DE を新たに A, B, C, D と書いて、

$$P = (A\cos px + B\sin px)(C\cos qy + D\sin qy)e^{-(p^2+q^2)\kappa t} \tag{8}$$

ここで、解の線形結合、すなわち解の重ね合わせを行うと、

$$P = \int_0^\infty dp \int_0^\infty dq(A(p)\cos px + B(p)\sin px)(C(q)\cos qy + D(q)\sin qy)e^{-(p^2+q^2)\kappa t} \tag{9}$$

初期条件を $P(x, 0, 0) = X(x) = f(x)$、$P(0, y, 0) = Y(y) = g(y)$ とすれば、式 (9) から

$$\int_0^\infty dp(A(p)\cos px + B(p)\sin px) = f(x) \tag{10}$$

$$\int_0^\infty dq(C(q)\cos qy + D(q)\sin qy) = g(y) \tag{11}$$

フーリエ積分公式

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\pi}\int_0^\infty d\omega(A(\omega)\cos\omega x + B(\omega)\sin\omega x)d\omega \\ A(\omega) &= \int_{-\infty}^\infty du(f(u)\cos\omega u du \\ B(\omega) &= \int_{-\infty}^\infty du(f(u)\sin\omega u du \end{aligned}$$

を用いれば、、

$$\begin{aligned} A(p) &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty d\xi f(\xi)\cos p\xi \\ B(p) &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty d\xi f(\xi)\sin p\xi \\ C(q) &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty d\eta g(\eta)\cos q\eta \\ D(q) &= \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^\infty d\eta g(\eta)\sin q\eta \end{aligned}$$

と各係数が決まる。これらを式 (9) に入れて整理すると、

$$P = \frac{1}{\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi)\int_{-\infty}^{\infty} d\eta g(\eta)\int_0^{\infty} dp \cos p(\xi - x)e^{-\kappa t p^2}\int_0^{\infty} dq \cos q(\eta - y)e^{-\kappa t q^2}$$

となり公式

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2}\cos bx dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{-\frac{b^2}{4a}}(a > 0)$$

を用いれば、

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} d\xi f(\xi)\frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}}e^{-\frac{-(\xi-x)^2}{4\kappa t}}\int_{-\infty}^{\infty} d\eta g(\eta)\frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa t}}e^{\frac{-(\eta-y)^2}{4\kappa t}}$$

となる。初期条件として、粒子は原点にいるとするとデルタ関数を用いて、$f(x) = \delta(x)$,$g(y) = \delta(y)$ と表せる。よって、

$$P(x, y, t) = \frac{1}{4\pi\kappa t}e^{-\frac{x^2+y^2}{4\kappa t}} \tag{12}$$

となる。ガウス積分を用いて、$\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy P(x, y, t) = 1$ となることがわかる。確かに $P(x, y, t)$ は粒子が平面のどこかに存在する確率を表している。　ここで $r^2 = x^2 + y^2$ の期待値を求める。2 次元極座標を用いて、

$$\begin{aligned}
< r^2 > &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy(x^2 + y^2)P(x, y, t) \\
&= \int_0^{\infty} \frac{1}{4\pi\kappa t}r^2 e^{-\frac{r^2}{4\kappa t}}2\pi r dr \\
&= 4\kappa t\int_0^{\infty} te^{-t}dt \\
&= 4\kappa t \\
&= 4\frac{\Delta s^2}{4\Delta t}n\Delta t \\
&= \Delta s^2 n
\end{aligned}$$

よって、粒子は n 回動くと、原点から到達点までの平均値が $\sqrt{n}$ に比例することがわかる。特に $\Delta s = 1$ のとき、粒子の到達点までの平均値は $\sqrt{n}$ となる。