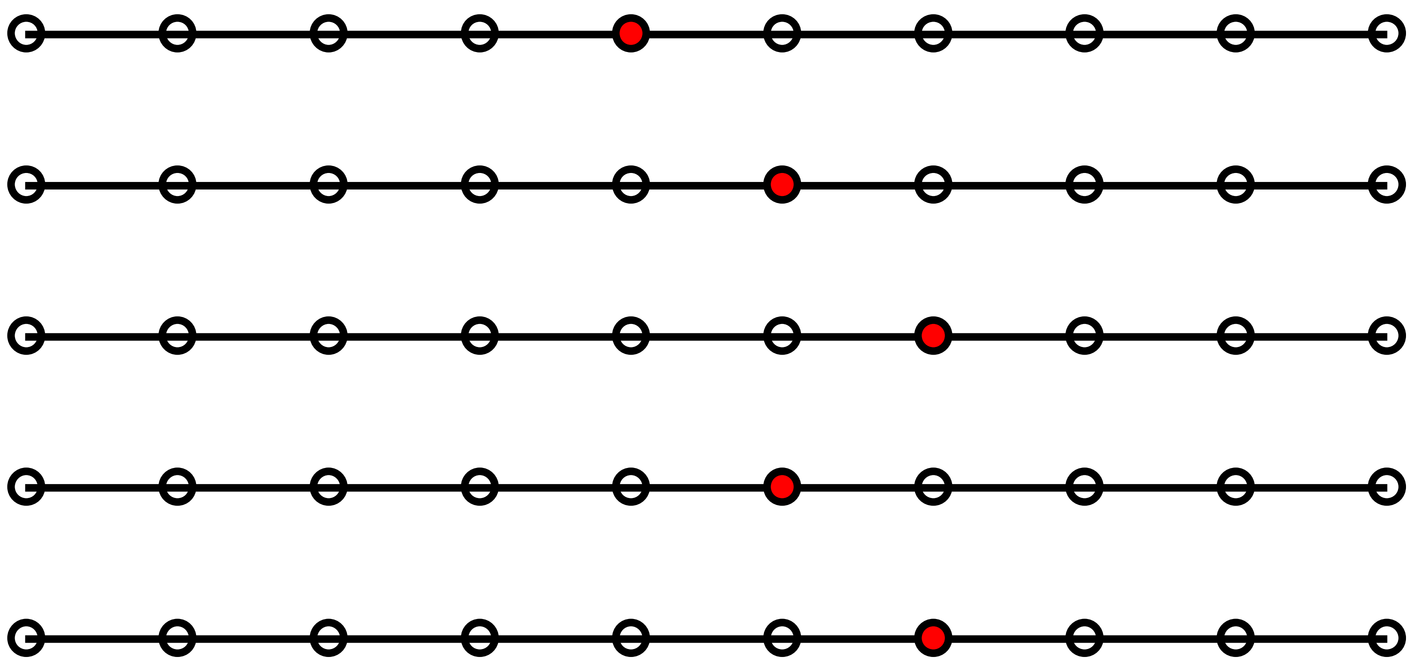
醉步 (Random Walk)

酔歩(Random Walk)とは

- 格子上をでたらめに粒子が移動
- 拡散現象などのモデル



1次元酔歩

- 1次元の格子上を粒子が移動(右を正とする)
- 確率p で右に、確率$1-p$ で左に移動する
- N 回の時間ステップ
  - 右に m 回、左に $N-m$ 回移動する確率

$$P_N(m)=\binom{N}{m}p^m(1-p)^{N-m}$$

  - そのときの位置 $2m-N$

- N 時間ステップ後の粒子の平均位置と分散

$$
\begin{aligned}
x(N) &= \sum_{m=0}^{N} (2\mathrm{m}-N)\binom{N}{m} p^{m}(1-p)^{N-m} \\
&= N(2p-1)
\end{aligned}
$$

$$\sigma^2(N) = \sum_{m=0}^{N} (2\mathrm{m} - N)^2 \binom{N}{m} p^m (1-p)^{N-m} - x(N)^2$$

$$= \sum_{m=0}^{N} (4m^2 - 4mN + N^2) \binom{N}{m} p^m (1-p)^{N-m} - x(N)^2$$

$$= 4pN + 4p^2 N(N-1) - 4pN^2 + N^2 - N^2(2p-1)^2$$

$$= 4pN(1-p)$$

- p=1/2 の場合
  - 平均位置は原点
  - 分散は時間に比例して増大する
- 粒子位置の分布はどうなるか

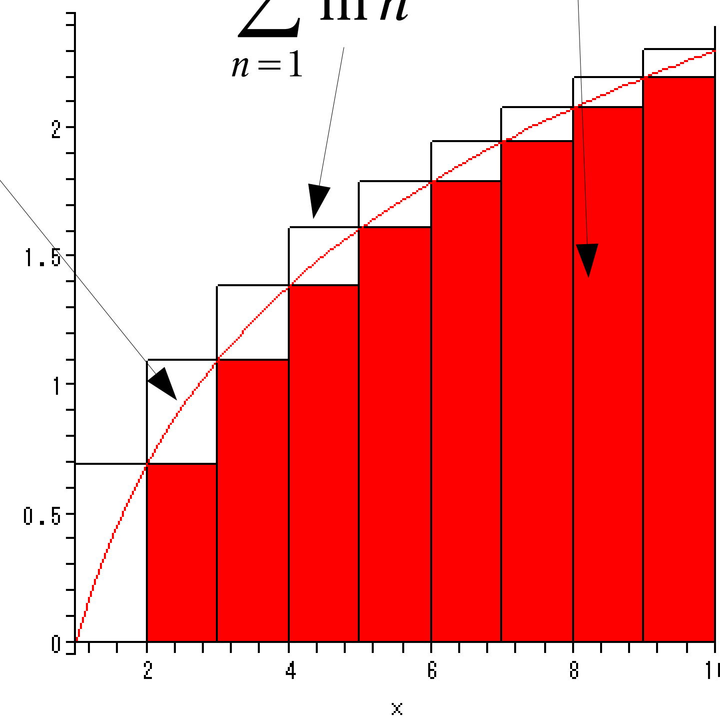
準備：Stirling の公式

- $N \gg 1$とする

$$\sum_{n=1}^{N} \ln n - \ln N$$

$$\int_1^N \ln x \, \mathrm{d}x$$

$$\sum_{n=1}^{N} \ln n$$



$$\int_1^N \ln x \, \mathrm{d}x < \sum_{n=1}^{N} \ln n < \int_1^N \ln x \, \mathrm{d}x + \ln N$$

$$\int_1^N \ln x \,\mathrm{d}\, x < \sum_{n=1}^{N} \ln n < \int_1^N \ln x \,\mathrm{d}\, x + \ln N$$

$$N\left(\ln N - 1\right) + 1 < \sum_{n=1}^{N} \ln n = \ln N! < N\left(\ln N - 1\right) + 1 + \ln N$$

$$\ln N! = N\left(\ln N - 1\right) + O\left(\ln N\right)$$

N ステップ後の位置の確率

$$P_N(m)=\binom{N}{m}p^m(1-p)^{N-m}$$

$$\ln P_N(m)=\ln N!-\ln(N-m)!-\ln m!+m\ln p+(N-m)\ln(1-p)$$

- N、$N-m$、m のいずれも1 より非常に大きいとして Stirling の公式を適用

$$\ln P_N(m)\sim N[\ln N-1]-(N-m)[\ln(N-m)-1]$$
$$-m(\ln m-1)+m\ln p+(N-m)\ln(1-p)$$

- m が平均値 pM から少しずれている範囲で考える

$$x = \frac{1}{N}\left(m - pN\right)$$

$$m = N\left(p + x\right)$$

$$N - m = N\left(1 - p - x\right)$$

$$
\begin{aligned}
\ln P_N(m) \sim\ & N[\ln N - 1] \\
& - N(1-p-x)\left[\ln N + \ln(1-p-x) - 1 - \ln(1-p)\right] \\
& - N(p+x)\left[\ln N + \ln(p+x) - 1 - \ln p\right] \\
=\ & - N(1-p-x)\left[\ln(1-p-x) - \ln(1-p)\right] \\
& - N(p+x)\left[\ln(p+x) - \ln p\right] \\
\sim\ & -\frac{N}{2p(1-p)} x^2 + O(x^3)
\end{aligned}
$$

- Gauss （正規）分布になる

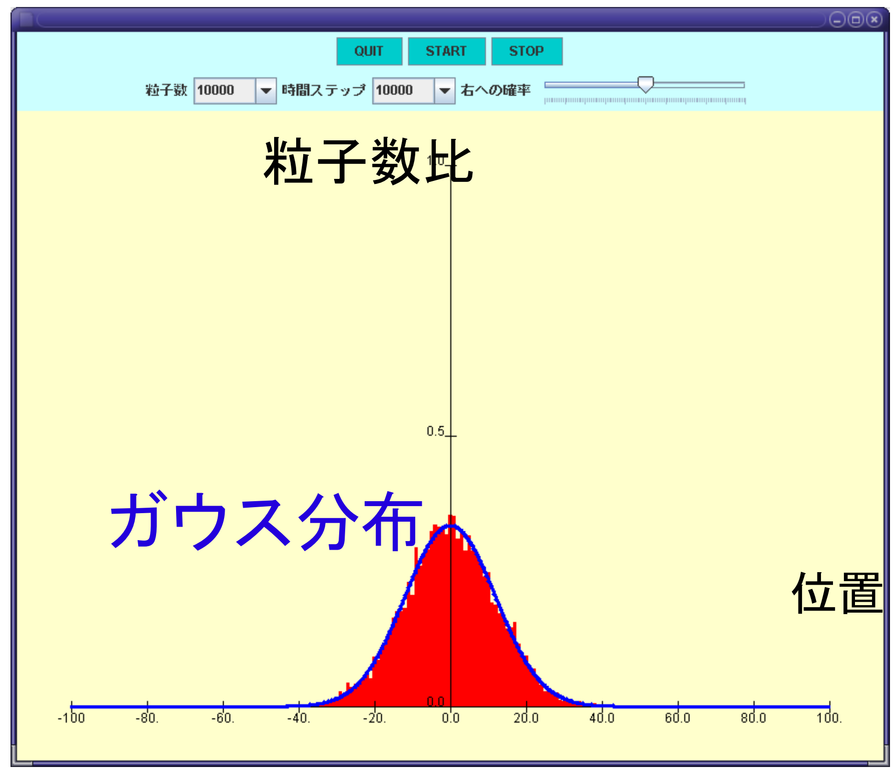
$$P_N(m) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(m - pN)^2}{2\sigma^2} \right)$$

$$\sigma^2 = p(1-p)N$$

- 中心極限定理の一つの例

実験

- 多数の粒子を原点から同時に酔歩させる
- 各時刻での各粒子の位置の分布を調べる
- ガウス分布を確認



拡散過程

- 位置を連続座標として表現しなおす
- 時刻 t で、粒子が $x < x(t) \leq x + \mathrm{d}\,x$ に居る確率

$$W(x, t)\,\mathrm{d}\,x = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x - \tilde{x})^2}{2\sigma^2} \right) \mathrm{d}\,x$$

$$\sigma^2 = 4p(1-p)t, \quad \tilde{x} = (2p-1)t$$

- 遷移確率

$$P\left(x_{0,}t_0 \middle| x_{1,}t_1\right)\mathrm{d}\,x_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\exp\left(-\frac{\left(\Delta\,x-\tilde{x}\right)^2}{2\sigma^2}\right)\mathrm{d}\,x_1$$

$$\sigma^2 = 4\,p\left(1-p\right)\Delta\,t\,,\quad \tilde{x} = \left(2\,p-1\right)\Delta\,t$$

$$\Delta\,x = x_1 - x_{0,}\quad \Delta\,t = t_1 - t_0$$

- 遷移確率は、以下の拡散方程式を満たす

$$\frac{\partial}{\partial t_1} P\left(x_{0,} t_0 \middle| x_{1,} t_1\right) = \left[D \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - v \frac{\partial}{\partial x_1} \right] P\left(x_{0,} t_0 \middle| x_{1,} t_1\right)$$

$$D = 2p(1-p), \quad v = 2p - 1$$

$$P\left(x_{0,} t_0 \middle| x_{1,} t_1\right) \mathrm{d}x_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi D \Delta t}} \exp\left(-\frac{\left(\Delta x - v \Delta t\right)^2}{4 D \Delta t} \right) \mathrm{d}x_1$$

$$\Delta x = x_1 - x_{0,} \quad \Delta t = t_1 - t_0$$

- 粒子密度

$$n(x,t)=\int n(x_0,t_0)\,P(x_0,t_0|x,t)\,\mathrm{d}x_0$$

- 演習問題：粒子密度も遷移確率と同じ拡散方程式を満たすことを示せ。

- 講義資料URL

http://aoba.cc.saga-u.ac.jp/lecture/ModelingAndSimulation/