酔歩

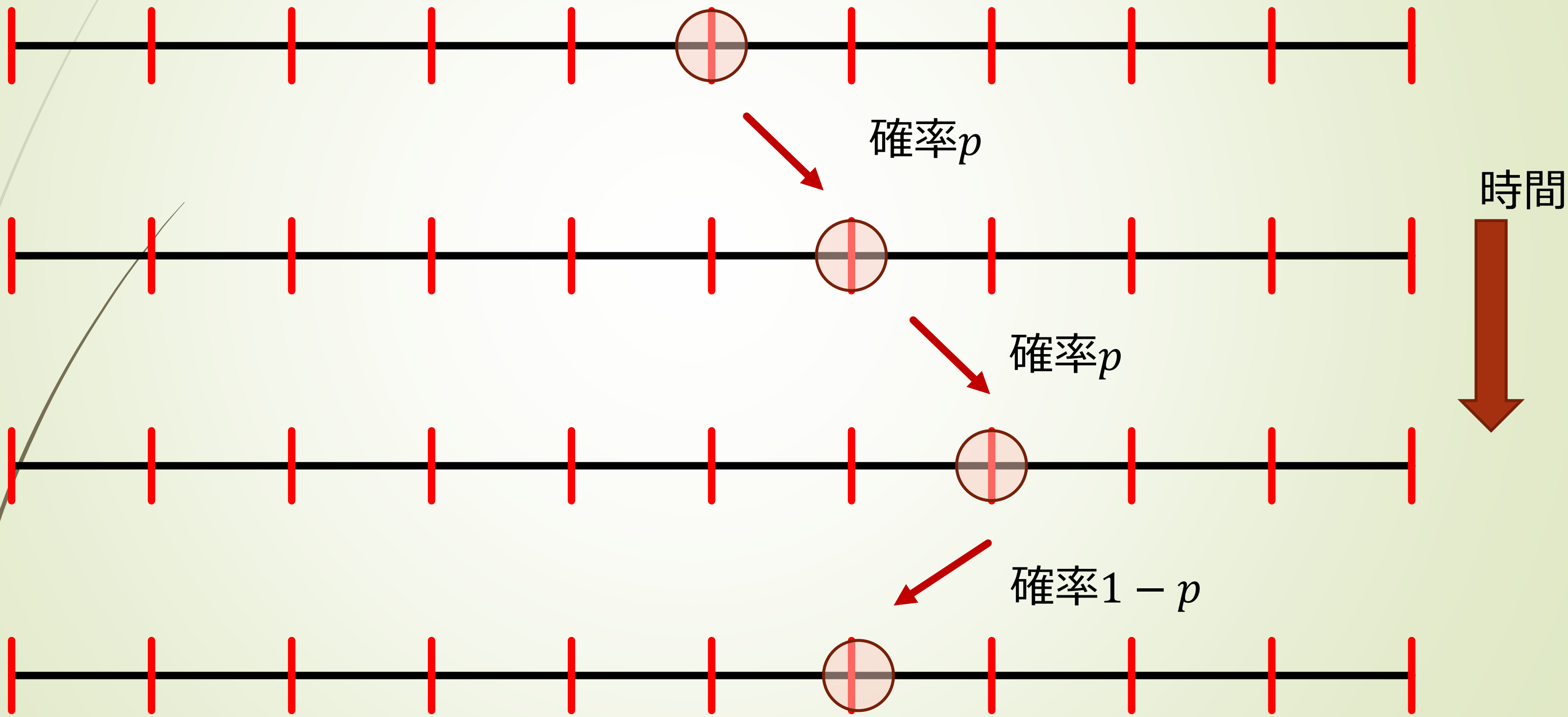
モデリングとシミュレーション

2020年度

確率過程 (Stochastic Processes)

- 確率過程：系の時間発展が確率的
- 酔歩(random walk)
  - 確率過程の標準モデル
  - 一次元格子
  - 各時刻で、確率p で右に、$1-p$ で左に移動

酔歩：イメージ



4

理論的解析

- 原点から出発した粒子の位置x
- 時刻t で位置x に至るためには
  - $m=(t+x)/2$回右に移動
  - 左右の移動順序の可能な組み合わせの数に注意
- 時刻t で位置x に至る確率：二項分布

$$P(x)=\binom{t}{\frac{t+x}{2}}p^{\frac{t+x}{2}}(1-p)^{\frac{t-x}{2}}$$

$$x=2m-t, m\in[0,t]$$

確率母関数を使う

$$
\begin{aligned}
G(z) &= \sum_{m=0}^{t} P(2m-t)\, p^{(t+2m-t)/2} q^{(t-2m+t)/2} z^m \\
&= \sum_{m=0}^{t} \binom{t}{m} p^m q^{t-m} z^m \\
&= (zp+q)^t = (zp+1-p)^t
\end{aligned}
$$

$P(2m-t)$は、mに関する確率であることに注意

確率母関数：一般論：復習

$$G(z)=\sum_{m=0}^{t}P(2m-1)z^{m}$$

$$G(1)=\sum_{m=0}^{t}P(2m-1)=1$$

$$G'(z)=\sum_{m=1}^{t}mP(2m-1)z^{m-1}$$

$$G'(1)=\sum_{x=0}^{t}mP(2m-1)=\langle m\rangle$$

$$G''(z)=\sum_{m=2}^{t}m(m-1)P(2m-1)z^{m-2}$$

$$G''(1)=\sum_{m=0}^{t}m(m-1)P(2m-1)=\langle m^{2}\rangle-\langle m\rangle$$

$$p(2m-t)=\binom{t}{m}p^m q^{t-m}, q=1-p$$

二項分布
に対して：復習

$$G(z)=\sum_{m=0}^{t}\binom{t}{m}p^m q^{t-m} z^m=(zp+q)^t$$

$$G(1)=1$$

$$G'(z)=tp(zp+q)^{t-1}$$

$$G'(1)=tp$$

- $\langle m\rangle = tp$
- $\langle x\rangle = \langle 2m-t\rangle = 2tp-t = t(2p-1)$

$$G''(z) = t(t-1)\,p^2\,(zp+q)^{t-2}$$

$$G''(1) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle = t(t-1)\,p^2$$

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle 4m^2 - 4mt + t^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \\
&= 4\left(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle\right) + 4\langle m \rangle (1-t) + t^2 - \langle x \rangle^2 \\
&= 4G''(1) + 4\langle m \rangle (1-t) + t^2 - \langle x \rangle^2 \\
&= 4tp^2(t-1) + 4tp(1-t) + t^2 - t^2\left(4p^2 - 4p + 1\right) \\
&\boxed{= 4tp(1-p)}
\end{aligned}$$

分布をもっと調べる

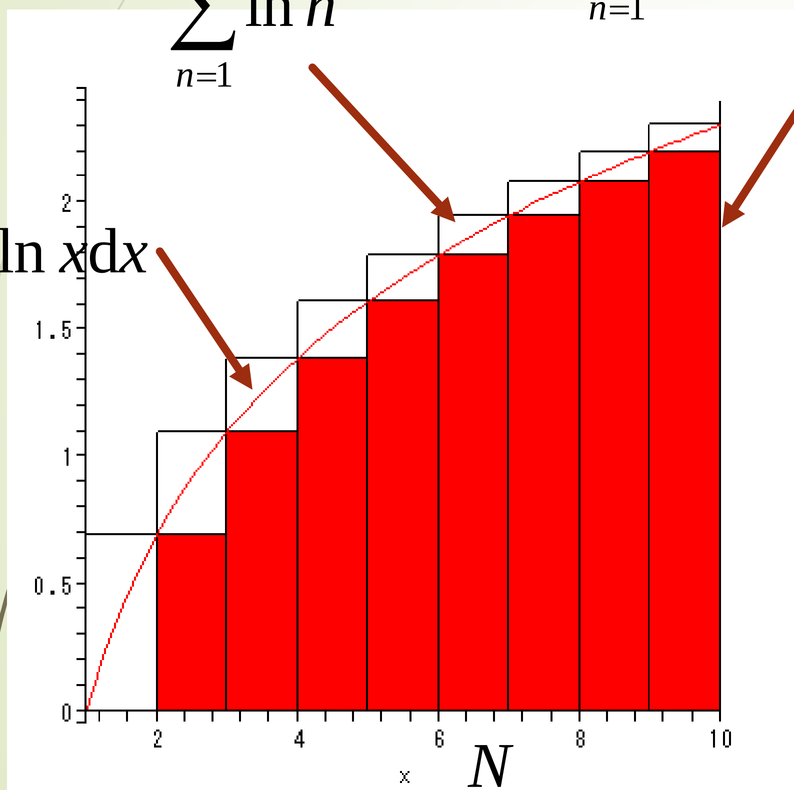
- 位置の平均は$\langle x \rangle = t(2p-1)$
  - 位置の平均は時間tに比例して移動
- 分散は$\sigma^2 = 4tp(1-p)$
  - 平均の周りの拡がりは$t^{1/2}$で拡大
- 時刻tが十分に大きいときに、位置の平均値の周囲の様子を調べる
  - 大きな整数の階乗の扱いに工夫

準備：Stiringの公式

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

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

$$\int_1^N \ln x dx$$



$$\int_1^N \ln x dx < \sum_{n=1}^{N} \ln n$$

$$\sum_{n=1}^{N} \ln n - \ln N < \int_1^N \ln x dx$$

$$\int_1^N \ln x dx < \sum_{n=1}^{N} \ln n = \ln N! < \int_1^N \ln x dx + \ln N$$

Stiringの公式（続き）

$$\int_1^N \ln x\mathrm{d}x < \ln(N!) < \int_1^N \ln x\mathrm{d}x + \ln N$$

$$N(\ln N - 1) + 1 < \ln(N!) < N(\ln N - 1) + 1 + \ln N$$

$$\ln N! = N(\ln N - 1) + O(\ln N)$$ Stiringの公式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(x\ln x - x) = \ln x + 1 - 1 = \ln x$$

両辺を積分

$$\int \ln x\mathrm{d}x = x\ln x - x + C$$

分布の展開

- 仮定$t, t-m, m \gg 1$

$$P(2m-t)=\frac{t!}{(t-m)!m!}p^m q^{t-m},\quad q=1-p$$

対数を使うと積が和になる

$$\ln P(2m-t)=\ln t!-\ln(t-m)!-\ln m!+m\ln p+(t-m)q$$

$$\sim t(\ln t-1)-(t-m)(\ln(t-m)-1)-m(\ln m-1)$$

$$+m\ln p+(t-m)\ln q$$

$$\sim t\ln t-(t-m)\ln(t-m)-m\ln m+m\ln p+(t-m)\ln q$$

- mが平均tpから少しずれている
  - 小さなずれをξとおく

$$\xi = \frac{1}{t}\left(m - tp\right)$$

$$m = t\left(p + \xi\right)$$

$$t - m = t\left(1 - p - \xi\right)$$

微小なξで展開

$$\ln P(2m-t) \sim t\ln t - (t-m)\ln(t-m) - m\ln m + m\ln p + (t-m)\ln q$$

$$\sim t\ln t - t(1-p-\xi)\ln t(1-p-\xi) - t(p+\xi)\ln t(p+\xi)$$

$$+m\ln p + (t-m)\ln q$$

$$\sim -t(1-p-\xi)\ln(1-p-\xi) - t(p+\xi)\ln(p+\xi)$$

$$+t(p+\xi)\ln p + t(1-p-\xi)\ln q$$

$$\ln(1+\xi) = \xi - \frac{\xi^2}{2} + O(\xi^3)$$

$$\ln(1-\xi) = -\xi - \frac{\xi^2}{2} + O(\xi^3)$$

$$
\begin{aligned}
&-t(p+\xi)\ln(p+\xi)+t(p+\xi)\ln p \\
&=-t(p+\xi)\ln(1+\xi/p) \\
&=-t(p+\xi)\left(\frac{\xi}{p}-\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{p^2}+O(\xi^2)\right)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&-t(1-p-\xi)\ln(1-p-\xi)+t(1-p-\xi)\ln q \\
&=-t(q-\xi)\ln(1-\xi/q) \\
&=t(q-\xi)\left(\frac{\xi}{q}+\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{q^2}+O(\xi^3)\right)
\end{aligned}
$$

$$-t\left(p+\xi\right)\left(\frac{\xi}{p}-\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{p^2}+O\left(\xi^3\right)\right)+t\left(q-\xi\right)\left(\frac{\xi}{q}+\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{q^2}+O\left(\xi^3\right)\right)$$

$$=t\left[-\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{p}-\frac{1}{2}\frac{\xi^2}{q}+O\left(\xi^3\right)\right]=-\frac{1}{2}\frac{t\xi^2}{p\left(1-p\right)}+tO\left(\xi^3\right)$$

$$\boxed{P\left(2m-t\right)\propto\exp\left(-\frac{\left(m-tp\right)^2}{2tp\left(1-p\right)}\right)}$$

$$\boxed{\left\langle m^2\right\rangle-\left\langle m\right\rangle^2=tp^2\left(-1+t\right)+tp-t^2p^2=tp\left(1-p\right)}$$

位置の分布

- $m = (x + t)/2$を代入する

$$P(x) \propto \exp\left[-\frac{\left(\frac{x+t}{2} - tp \right)^2}{2tp(1-p)} \right] = \exp\left[-\frac{\left(x - (2p-1)t \right)^2}{8tp(1-p)} \right]$$

$$= \exp\left[-\frac{\left(x - \langle x \rangle \right)^2}{2\sigma^2} \right]$$

正規分布

$$\sigma^2 = 4tp(1-p)$$

酔歩のシミュレーション Simulation of Random Walk

- 何を知りたいのか
  - 「一つの粒子がどこに行くか」ではない
- 時刻とともに、粒子の存在確率がどのように変化するか
- 一つの粒子を追跡するのではない

多数の粒子の一斉酔歩

- 多数の酔歩を行う粒子を準備
  - 初期位置は同じ
  - お互いに独立に動く
- 各時刻で、全粒子を酔歩
  - 粒子の位置のヒストグラムを作る
  - 一つおきの位置になることに注意

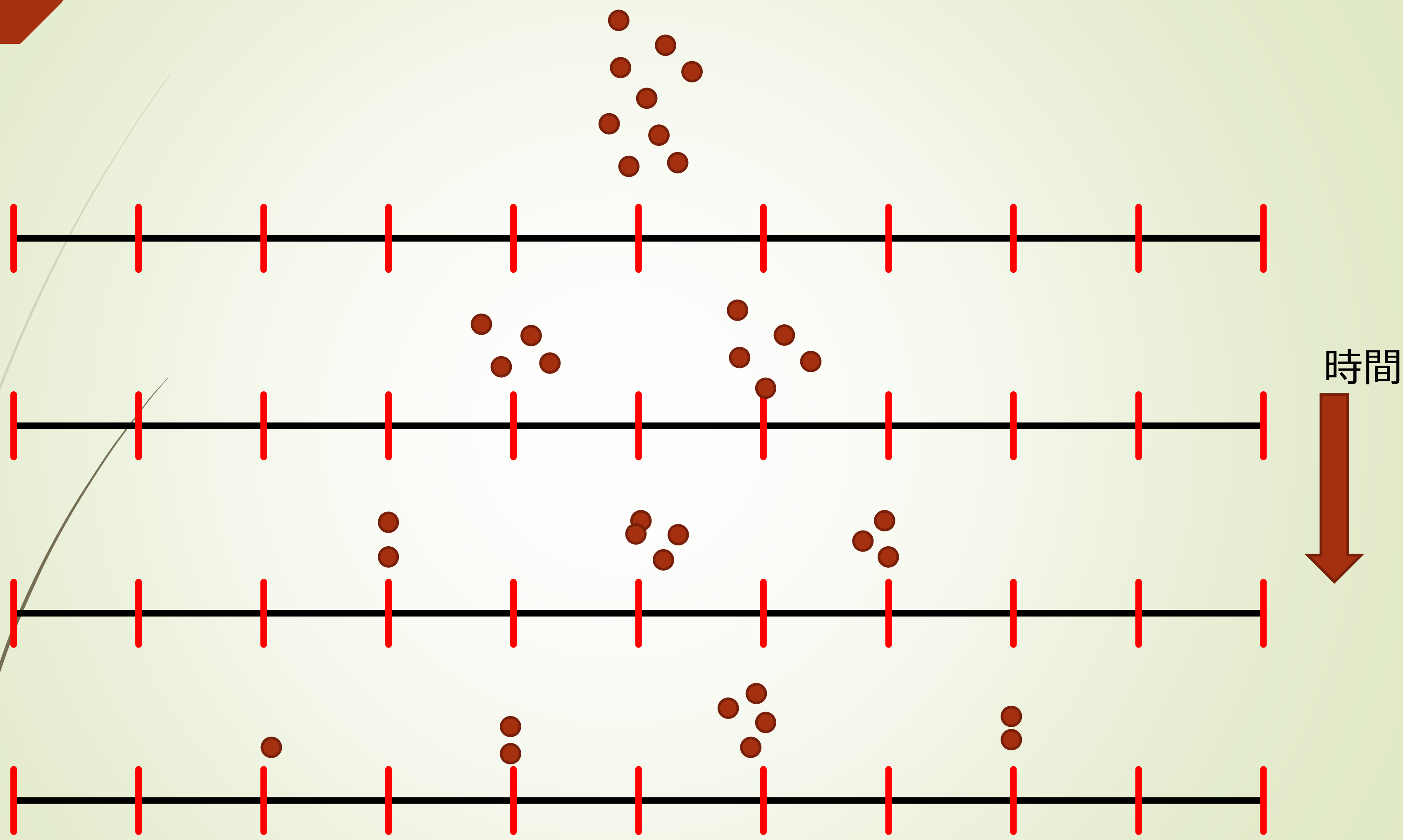
「確率pで○○する」コード

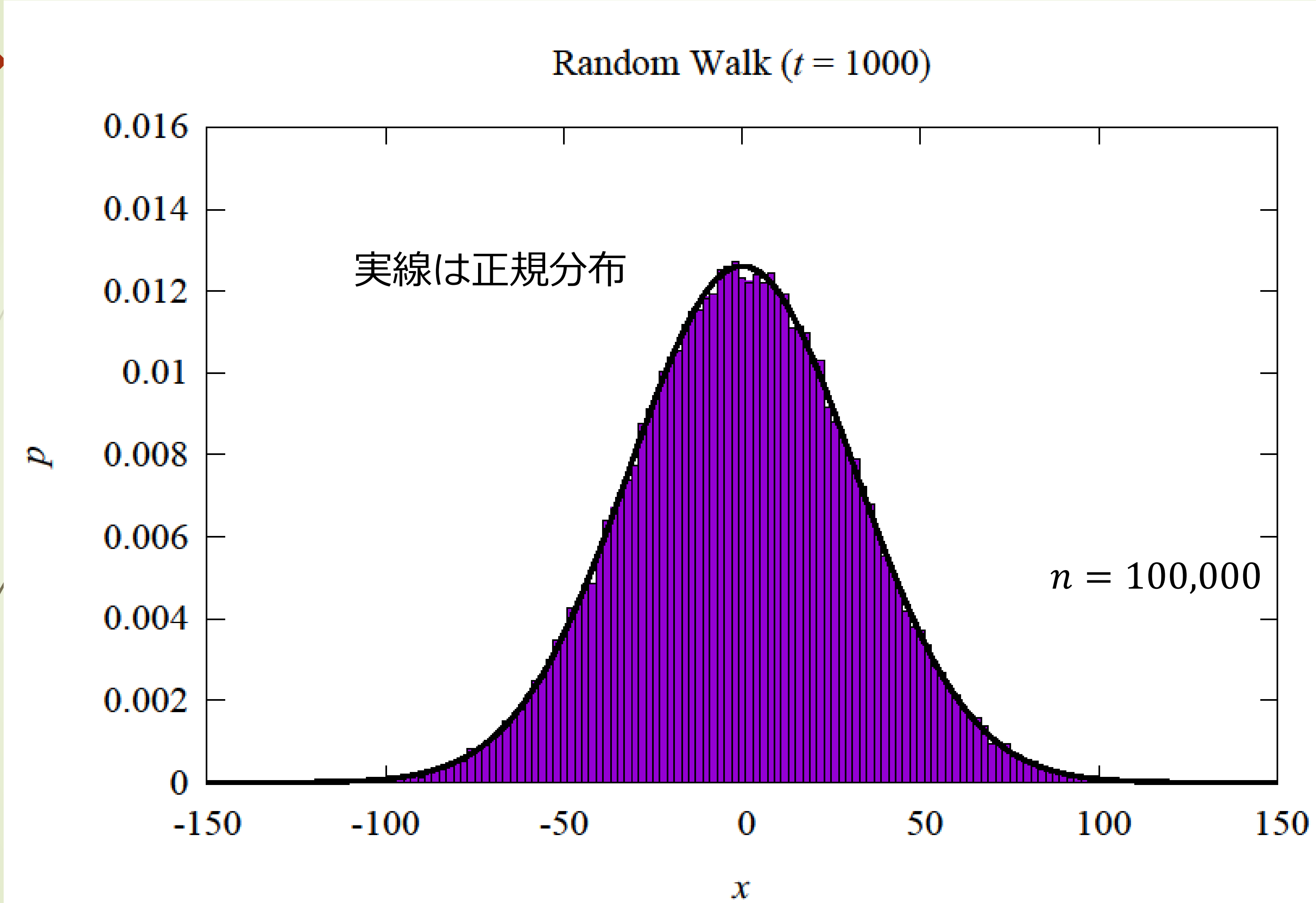
```
double r = 乱数を生成
if ( r < p ) {
    ○○;
}
```

一つの粒子を動かす

```
public int walk(){
    double r = 乱数を生成
    if (r < p) {//確率p で右へ
        x++;
    } else {//確率1-p で左へ
        x--;
    }
    return x;
}
```

酔歩シミュレーションイメージ




Random Walk (t = 1000)
0.016
0.014
0.012
0.01
0.008
0.006
0.004
0.002
0
p
-150
-100
-50
0
50
100
150
x
実線は正規分布
n = 100,000