

酔歩

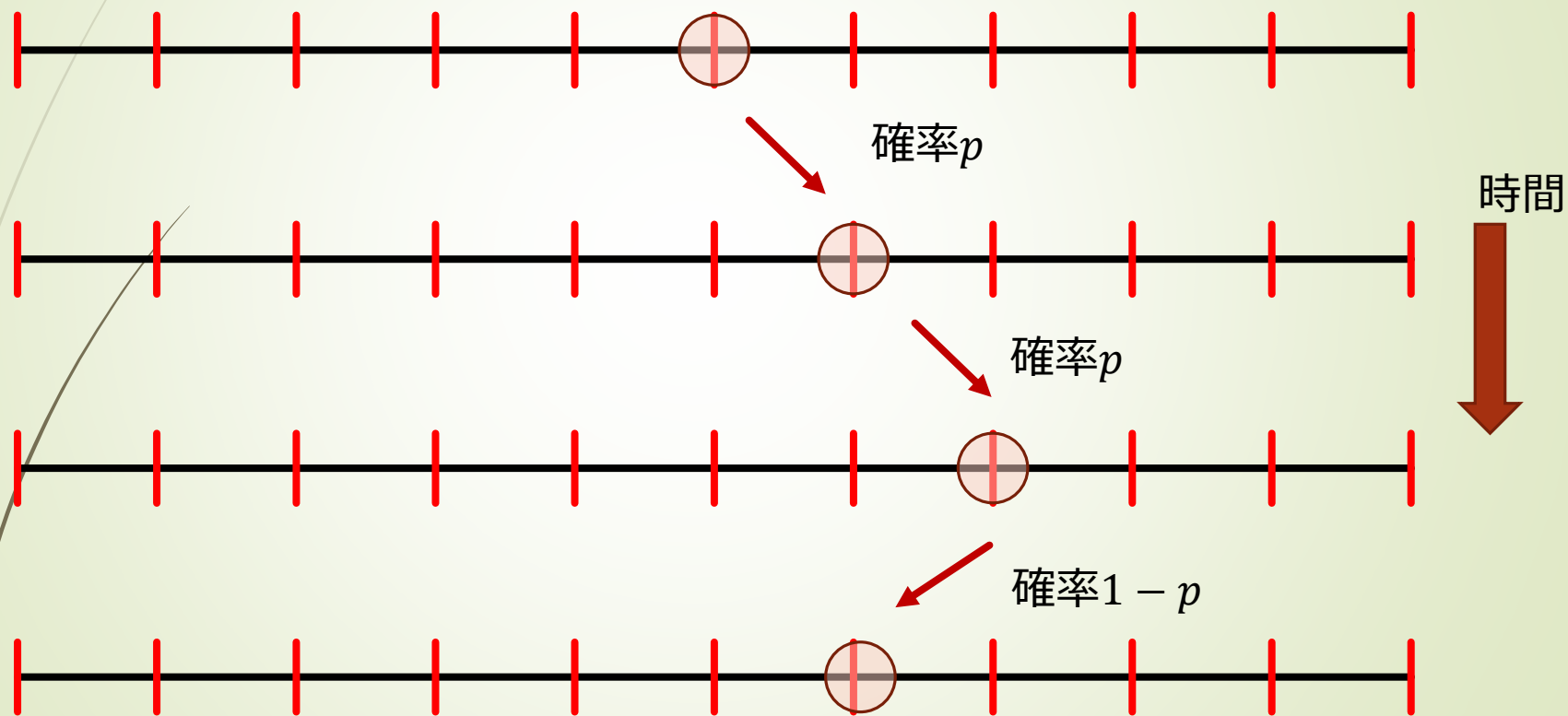
モデリングとシミュレーション

2019年度

確率過程 (Stochastic Processes)

- ➡ 確率過程：系の時間発展が非決定的
 - ➡ 確率的に時間発展する
- ➡ 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



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**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

二項分布 $P(2m-t) = \binom{t}{m} p^m q^{t-m}$
に対して：復習

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

$$G(1) = 1$$

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

$$G'(1) = tp$$

$$\langle m \rangle = tp$$

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

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

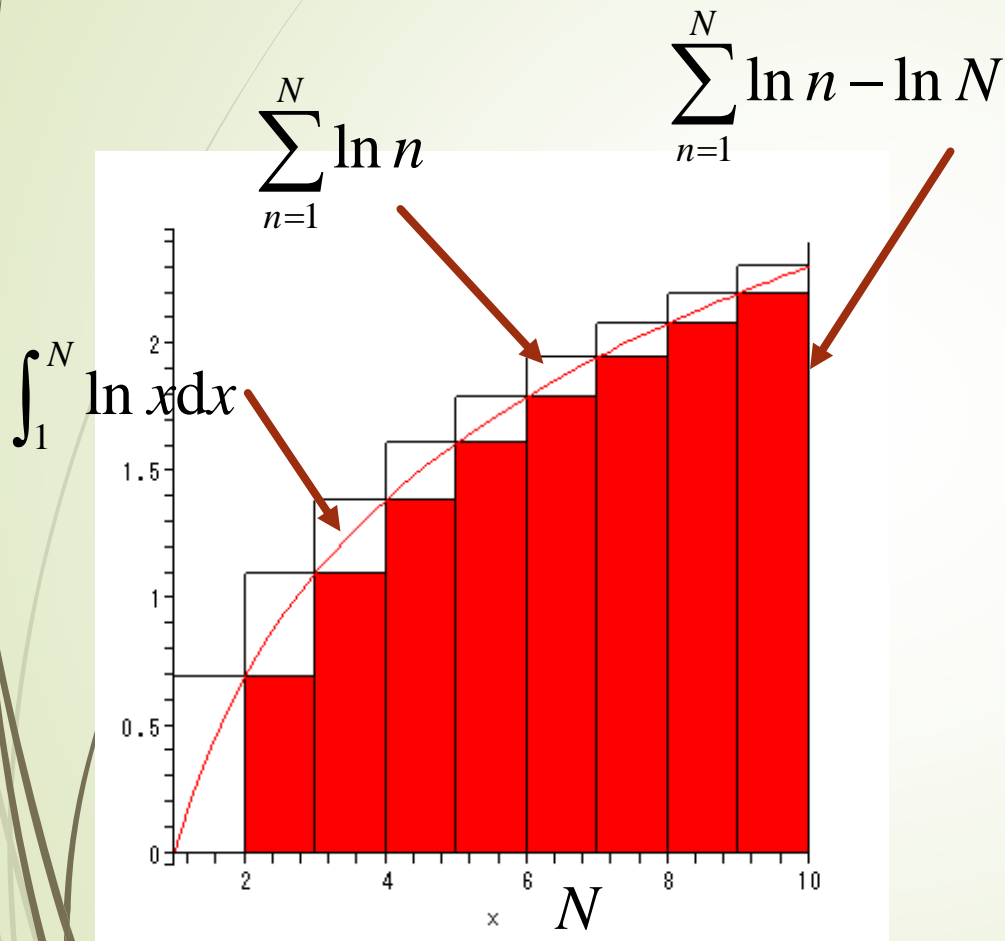
$$G''(1) = \langle m^2 \rangle - \langle m \rangle = t(t-1)p^2$$

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

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：Stirlingの公式



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

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



©只木進一 (佐賀大学)

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

Stirlingの公式 (続き)

$$\int_1^N \ln x dx < \ln(N!) < \int_1^N \ln x dx + \ln N$$

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



$$\ln N! = N(\ln N - 1) + O(\ln N) \quad \text{Stirlingの公式}$$

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



両辺を積分

$$\int \ln x dx = x \ln x - x + C$$

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

$$\begin{aligned} \ln P(2m - t) &= \ln t! - \ln(t - m)! - \ln m! + m \ln p + (t - m) \ln q \\ &\sim t(\ln t - 1) - (t - m)(\ln(t - m) - 1) - m(\ln m - 1) \\ &\quad + m \ln p + (t - m) \ln q \\ &\sim t \ln t - (t - m) \ln(t - m) - m \ln m + m \ln p + (t - m) \ln q \end{aligned}$$

- ▶ m が平均 tp から少しずれている
 - ▶ 小さなずれを ξ とおく

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

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

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

微小な ξ で展開

$$\begin{aligned}
 \ln P(2m-t) &\sim t \ln t - (t-m) \ln(t-m) - m \ln m + m \ln p + (t-m) \ln q \\
 &\sim t \ln t - t(1-p-\xi) \ln t(1-p-\xi) - t(p+\xi) \ln t(p+\xi) \\
 &\quad + m \ln p + (t-m) \ln q \\
 &\sim -t(1-p-\xi) \ln(1-p-\xi) - t(p+\xi) \ln(p+\xi) \\
 &\quad + t(p+\xi) \ln p + t(1-p-\xi) \ln q
 \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

位置の分布

➡ $m = (x + t)/2$ を代入する

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

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

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

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 で〇〇する」コード

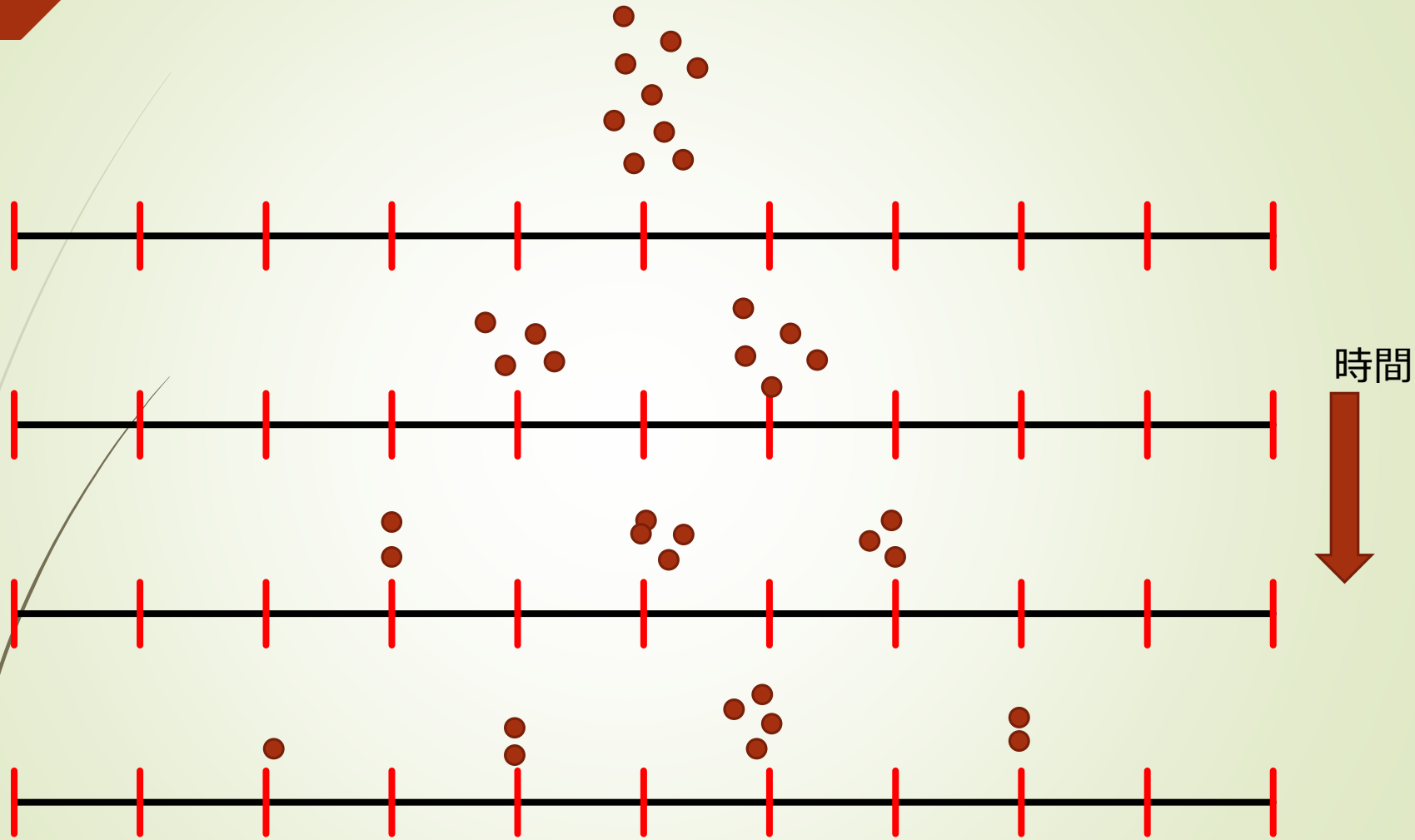
```
double r = 乱数を生成  
if ( r < p ) {  
    〇〇;  
}
```

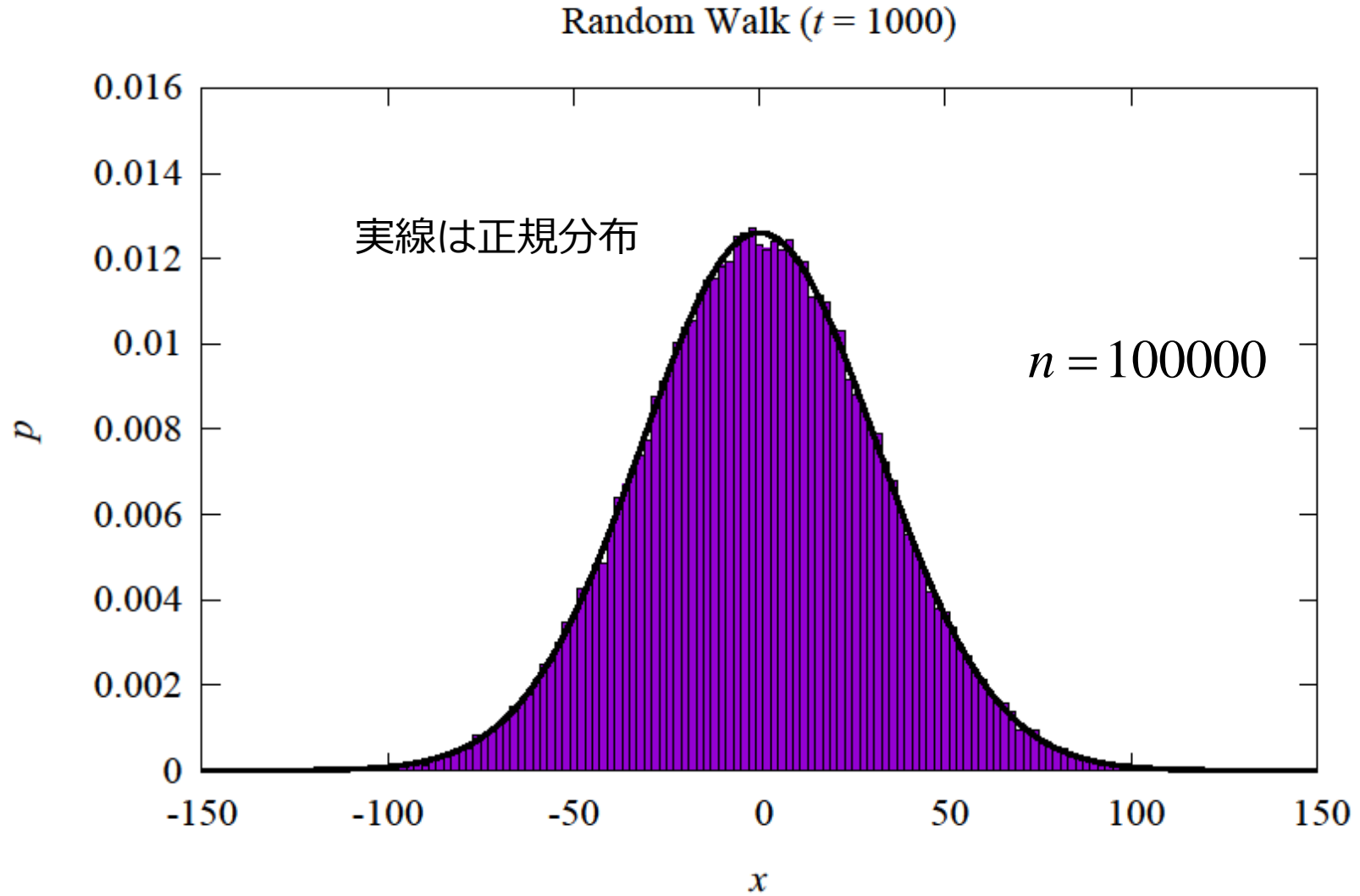
一つの粒子を動かす

```
public int walk(){
    double r = Math.random();
    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

22





発展

- 2次元の酔歩
- 境界での振る舞い
 - 境界で反射
 - 境界で吸収
- 連続系
- 中心極限定理