Random Walk の帰還確率

tobiom

September 2023
(最終更新 2023 年 9 月 9 日)

1　Random Walk の設定

数直線上の格子点を考える。点 P が時刻 $t = m \in \mathbb{Z}_{>0}$ において格子点 $x_m \in \mathbb{Z}$ に存在する時、点 P は時刻 $t = m + 1$ において $1/2$ の確率で $x_m - 1$ か $x_m + 1$ に移動する。この点 P が時刻 $t = 0$ に原点から出発するとき、点 P がいつか原点に戻ってくる確率 p を求める。

以下では Random Walk を RW で表記する。

2　母関数

帰還確率 p を求めるにあたり、以下の確率を考える。

$$g_n := \text{時刻 } n \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \text{ に点 } P \text{ が原点にいる確率} \tag{1}$$

$$f_n := \text{時刻 } n \in \mathbb{Z}_{>0} \text{ に点 } P \text{ が初めて原点に戻る確率} \tag{2}$$

ここで時刻 n の範囲が f_n と g_n で異なっているのは、時刻 $t = 0$ の時点で点 P が原点にいることを考慮しているためである。確率 g_n について、これは時刻 $t = k(0 < k < n)$ に原点にいた点 P がその後 $n - k$ の時間を経てもう一度原点に戻ってくる確率の総和と解釈できる。つまり、式の上では

$$g_n = g_{n-1}f_1 + g_{n-2}f_2 + \cdots + g_1 f_{n-1} + g_0 f_n = \sum_{k=0}^{n-1} g_k f_{n-k} \tag{3}$$

である。ここで、これらの確率に対する母関数として以下で定義される $F(z)$ と $G(z)$ を導入する。

$$F(z) := \sum_{n=1}^{\infty} f_n z^n \qquad G(z) := \sum_{n=0}^{\infty} g_n z^n \tag{4}$$

母関数 $G(z)$ で総和をとっている各項に関しては、(3) を用いると

$$g_n z^n = \sum_{k=0}^{n-1} g_k f_{n-k} z^n = \sum_{k=0}^{n-1} (g_k z^k)(f_{n-k} z^{n-k}) \tag{5}$$

と変形できるので、この両辺に対して n に関する総和をとると母関数 $G(z)$ が

$$\begin{aligned} G(z) =& 1 + \sum_{n=1}^{\infty} g_n z^n && (6)\\ =& 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{n-1} (g_k z^k)(f_{n-k} z^{n-k}) && (7)\\ =& 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} (g_k z^k)(f_l z^l) && (8)\\ =& 1 + \left(\sum_{k=0}^{\infty} g_k z^k\right)\left(\sum_{l=1}^{\infty} f_l z^l\right) && (9)\\ =& 1 + G(z)F(z) && (10) \end{aligned}$$

と変形できる。ただし、一行目で $g_0 = 1$ を用いて、三行目で n についての総和を $n = k + l$ なる新しい変数 l による総和に書き換えている。ここから、2 つの母関数 $F(z)$ と $G(z)$ の関係式

$$F(z) = 1 - \frac{1}{G(z)} \tag{11}$$

が得られる。

a　母関数 $G(z)$ の具体形

関係式が得られたところで、母関数 $G(z)$ の具体形について考えていく。原点を出発した点 P が原点に戻ってくるためには、最終的に $k \in \mathbb{Z}_{>0}$ 回だけ +1 の方向に進み、同じ k 回だけ −1 の方向に進めば良い。従って、奇数時刻に原点に戻ってくる場合の数は 0 であり、偶数時刻 $2k$ に原点へ戻ってくる場合の数は k 個の +1 と k 個の −1 を並べる場合の数 $\frac{(2k)!}{k!k!}$ である。このことから、確率 g_n は

$$g_n = \begin{cases} 0 & n \text{ が奇数の時} \\ \left(\frac{1}{2}\right)^{2k} \times \frac{(2k)!}{k!k!} & n \text{ が偶数で} = 2k \text{ の時} \end{cases} \tag{12}$$

となる。これを代入することで母関数 $G(z)$ の具体形が決定される。

$$G(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{1}{2}\right)^{2k} \frac{(2k)!}{k!k!} z^{2k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} \left(\frac{z}{2}\right)^{2k} = \left[\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} x^k\right]_{x=(z/2)^2} \tag{13}$$

問題は括弧内の総和計算だが、この総和を $h(x)$ とおいて式変形していくと

$$h(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} x^k \tag{14}$$

$$=1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} x^k \tag{15}$$

$$=1 + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} \left(\frac{(2k+1)(2k+2)}{(k+1)^2} \right) x^{k+1} \qquad (k \to k+1) \tag{16}$$

$$=1 + x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} \left(4 - \frac{2}{k+1} \right) x^k \tag{17}$$

$$=1 + 4x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} x^k - 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} \frac{x^{k+1}}{k+1} \tag{18}$$

$$=1 + 4x \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} x^{2k} - 2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2k)!}{k!k!} \int_0^x dt \ t^k \tag{19}$$

$$=1 + 4xh(x) - 2 \int_0^x dt \ h(t) \tag{20}$$

と計算できる。この両辺を x で微分すると、微分方程式

$$h'(x) = 4h(x) + 4xh'(x) - 2h(x) \tag{21}$$

を得る。この関数 $h(x)$ は定義から $h(0) = 1$ を満たすので、微分方程式 (21) を初期条件 $h(0) = 1$ を課して解くと、$h(x)$ を以下のように特定することが出来る。

$$h(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - 4x}} \tag{22}$$

従って、求めたかった母関数 $G(z)$ は

$$G(z) = h((z/2)^2) = \frac{1}{\sqrt{1 - z^2}} \tag{23}$$

と求まる。

3 Random Walk の帰還確率

上で定義した母関数から、RW の帰還確率 p を表してみる。点 P の帰還確率は、点 P が原点に戻ってくるような時刻 $n \in \mathbb{Z}_{>0}$ が存在する確率に等しい。すなわち、点 P が時刻 n で初めて原点に戻ってくる確率の総和が、RW の帰還確率になっている。こ

れは確率 f_n と母関数 $F(z)$ の定義から以下のようになる。

$$p = \sum_{n=1}^{\infty} f_n = \left[\sum_{n=1}^{\infty} f_n z^n\right]_{z=1} = F(1) = 1 - \frac{1}{G(1)} \tag{24}$$

すなわち母関数 $G(z)$ の $z = 1$ での値から RW の帰還確率を計算できるが、これは先ほど計算した具体形 (23) から無限大に発散することがわかる。

$$\lim_{z\to 1} G(z) = +\infty \tag{25}$$

従って $z \to 1$ のもとで $1/G(z) \to 0$ であるので、結局 (24) から RW の帰還確率は $p = 1$ である。すなわち、点 P はいつか必ず原点に戻ってくる、ということが言える。

4　3 次元 Random Walk の帰還確率 p_3

高次元 RW の (有名？) 事実として、3 次元以上の RW では帰還確率が 1 を割る、というものがある。先ほどの計算を拡張することで、この事実を実際に確かめてみる。前節で考えた帰還確率の計算で肝となったのは、母関数 $G(z)$ による計算の書き換えだった。そこで、同様にして母関数 $G(z)$ に相当するものを経由して、帰還確率 p_3 を計算することを考える。先ほどの +1 を −1 を同数並べる場合の数の拡張として、x, y, z についての多項式

$$\left(x + \frac{1}{x} + y + \frac{1}{y} + z + \frac{1}{z}\right)^k \tag{26}$$

の展開係数を考える。この多項式において、$x^{\pm 1}$ は x 軸方向への ±1 移動に対応している。例えば x 軸方向に +1 移動と −1 移動をを 2 回と 1 回、y 軸方向に +1 移動を 3 回行った結果として点 P は点 $(1, 3, 0)$ に移動することになるが、これは $(x^{+1})^2(x^{-1})^1(y^{+1})^3 = xy^3$ と表すことが出来る。すなわち、x, y, z 軸方向に $n_\pm, m_\pm, l_\pm$ 回だけ ±1 移動して原点から点 $(n_+ - n_-, m_+ - m_-, l_+ - l_-)$ に移動する操作は

$$(x^{+1})^{n_+}(x^{-1})^{n_-}(y^{+1})^{m_+}(y^{-1})^{m_-}(z^{+1})^{l_+}(z^{-1})^{l_-} = x^{n_+-n_-}y^{m_+-m_-}z^{l_+-l_-} \tag{27}$$

によって表現されており、これに対応する場合の数は

$$\left(x + \frac{1}{x} + y + \frac{1}{y} + z + \frac{1}{z}\right)^k \qquad (k = n_+ + n_- + m_+ + m_- + l_+ + l_-) \tag{28}$$

における $x^{n_+-n_-}y^{m_+-m_-}z^{l_+-l_-}$ の展開係数で表される。従って、時刻 k で点 P が原点にいる場合の数は、この多項式における定数項 $x^0y^0z^0$ である。この定数項を取り出すには、周期関数 $e^{i\theta}$ の直交関係

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \left(e^{i\theta}\right)^n \left(e^{-i\theta}\right)^m = \delta_{n,m} \tag{29}$$

を用いれば良い。すなわち、求めたい場合の数は

$$\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\left(e^{i\theta_1}+e^{-i\theta_1}+e^{i\theta_2}+e^{-i\theta_2}+e^{i\theta_3}+e^{-i\theta_3}\right)^k \tag{30}$$

$$=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\{2(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)\}^k \tag{31}$$

である。ここで各方向へ移動する確率が 1/6 であることから、母関数 $G(z)$ の具体形は以下のように計算できる。

$$G(z)=\sum_{k=0}^{\infty}\left[\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\{2(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)\}^k\right]\left(\frac{z}{6}\right)^k \tag{32}$$

$$=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\sum_{k=0}^{\infty}\left(\frac{z(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)}{3}\right)^k \tag{33}$$

$$=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\frac{1}{1-\frac{z(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)}{3}} \tag{34}$$

$$=\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\frac{3}{3-z(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)} \tag{35}$$

さらに積分表示

$$\frac{1}{\lambda}=\int_0^{\infty}dt\ e^{-\lambda t}\qquad \text{for } \lambda>0 \tag{36}$$

を $\lambda=3-z(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3)$ に対して用いると

$$G(z)=3\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}\int_0^{\infty}dte^{-(3-z(\cos\theta_1+\cos\theta_2+\cos\theta_3))t} \tag{37}$$

$$=3\int_0^{\infty}dt\ e^{-3t}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_1}{2\pi}e^{zt\cos\theta_1}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_2}{2\pi}e^{zt\cos\theta_2}\int_0^{2\pi}\frac{d\theta_3}{2\pi}e^{zt\cos\theta_3} \tag{38}$$

$$=3\int_0^{\infty}dt\ e^{-3t}\left(\int_0^{2\pi}\frac{d\theta}{2\pi}e^{zt\cos\theta}\right)^3 \tag{39}$$

と変形できる。ここに修正 Bessel 関数 $I_0(z)$ の積分表示

$$I_0(z)=\int_0^{2\pi}\frac{d\phi}{2\pi}e^{z\cos\phi} \tag{40}$$

を使うと、最終的に母関数 $G(z)$ は

$$G(z)=3\int_0^{\infty}dt\ e^{-3t}\{I_0(zt)\}^3 \tag{41}$$

となる。

以上で母関数 $G(z)$ が決定されたので、前節と同様にして帰還確率を母関数 $F(z)$ を通して求めることが出来る。具体的には $z=1$ における母関数 (41) の値を $p_3 = F(1) = 1 - 1/G(1)$ に適用すれば良い。

$$p_3 = 1 - \left(3\int_0^\infty dt\ e^{-3t}\{I_0(t)\}^3\right)^{-1} \tag{42}$$

この修正 Bessel 関数の入った積分は容易には計算できないが[*1]、[GR43] の p.696 に記載されている公式

$$\int_0^\infty dx\ e^{-3x} I_n(x) I_m(x) I_l(x) = r_1 g + \frac{r_2}{\pi^2 g} + r_3 \tag{43}$$

を用いると計算することができる。ただし、g は

$$g = \frac{\sqrt{3}-1}{96\pi^3}\Gamma\left(\frac{1}{24}\right)^2\Gamma\left(\frac{11}{24}\right)^2 \tag{44}$$

と定義される定数であり、r_1, r_2, r_3 は n, m, l に依存する係数である。特に、今必要な $n = m = l$ の場合には $r_1 = 1, r_2 = r_3 = 0$ である [GR43]。結果として、これを使うと帰還確率が以下の閉形式で表すことが出来る。

$$p = 1 - \frac{16(1+\sqrt{3})}{\Gamma\left(\frac{1}{24}\right)^2\Gamma\left(\frac{11}{24}\right)^2}\pi^3 \tag{45}$$

これを数値計算すると $p \sim 0.34$ になる。

5 N 次元への拡張

3 次元 RW の計算をもとに、N 次元 RW への拡張ができる。先ほどと同様に、$x_1, x_2, \ldots, x_N$ の多項式として

$$\left(x_1 + \frac{1}{x_1} + \cdots + x_N + \frac{1}{x_N}\right)^k \tag{46}$$

を考えると、この中の $x_1^{k_1} x_2^{k_2} \cdots x_N^{k_N}$ $(k = k_1 + k_2 + \cdots + k_N)$ の係数が、時刻 k に点 P が座標 $(k_1, k_2, \ldots, k_N)$ に到達する場合の数になる。先ほどと同様に、定数項の値を周期関数 $e^{i\theta}$ の直交関係を利用して取り出し、k についての総和を実行して式変形すると、N 次元 RW の帰還確率 p_N として以下の式が得られる。

$$p_N = 1 - \left(N\int_0^\infty dt\ \left\{e^{-t} I_0(t)\right\}^N\right)^{-1} \tag{47}$$

---

*1 少なくともこれを書いている本人には無理だった。

N 次元 RW の帰還確率 p_N を各次元の場合に数値計算すると以下のようになる[*2*3]。

次元 N	N 次元 RW の帰還確率 p_N
3	0.3405190196284
4	0.1932016839194
5	0.1351788930722
10	0.0561975359710
30	0.0172576435700
50	0.0102073731263
100	0.0050508975733
1000	0.0005005008772
10000	0.0000500050009
20000	0.0000250012657
$\vdots$	$\vdots$
∞ $(N \to \infty)$	0 ?

Table 1: N 次元 RW の帰還確率

a　$N > 2$ で帰還確率が 1 を割ることの確認

帰還確率 (47) の第二項について、分母には被積分関数に修正 Bessel 関数 $I_0(t)$ が現れている。これの漸近形は以下の式で表すことができる。

$$I_0(t) = 1 + \left(\frac{t}{2}\right)^2 + \mathcal{O}(t^3) \qquad (t \ll 1) \tag{48}$$

$$I_0(t) \sim \frac{e^t}{\sqrt{2\pi t}} \qquad (t \to \infty) \tag{49}$$

原点近傍での振る舞い (48) から、この領域ではもう一つの因子である e^{-t} で十分抑えられると考えて良い。よって、積分の挙動を大まかに見るには、遠方で漸近形 (49) を適用すれば十分である。そこで修正 Bessel 関数 $I_0(t)$ を以下で近似する。

$$I_0(t) \sim \begin{cases} 1 & \text{for } 0 < t < 1 \\ \dfrac{e^t}{\sqrt{2\pi t}} & \text{for } 1 < t \end{cases} \tag{50}$$

被積分関数は $(e^{-x} I_0(x))$ の N 乗として与えられているが、この近似を適用する前後で関数形を比較すると図 1 になる。ここからも、大体良い感じに近似出来ていること

[*2] Mathematica で評価したが、誤差を考えてないので高次元ほど誤差が大きい可能性はある…

[*3] $N \to \infty$ で多分 0 になるが、解析的にはちゃんと確認していない。積分の極限を確かめれば良いと思われる。

が確認できる。

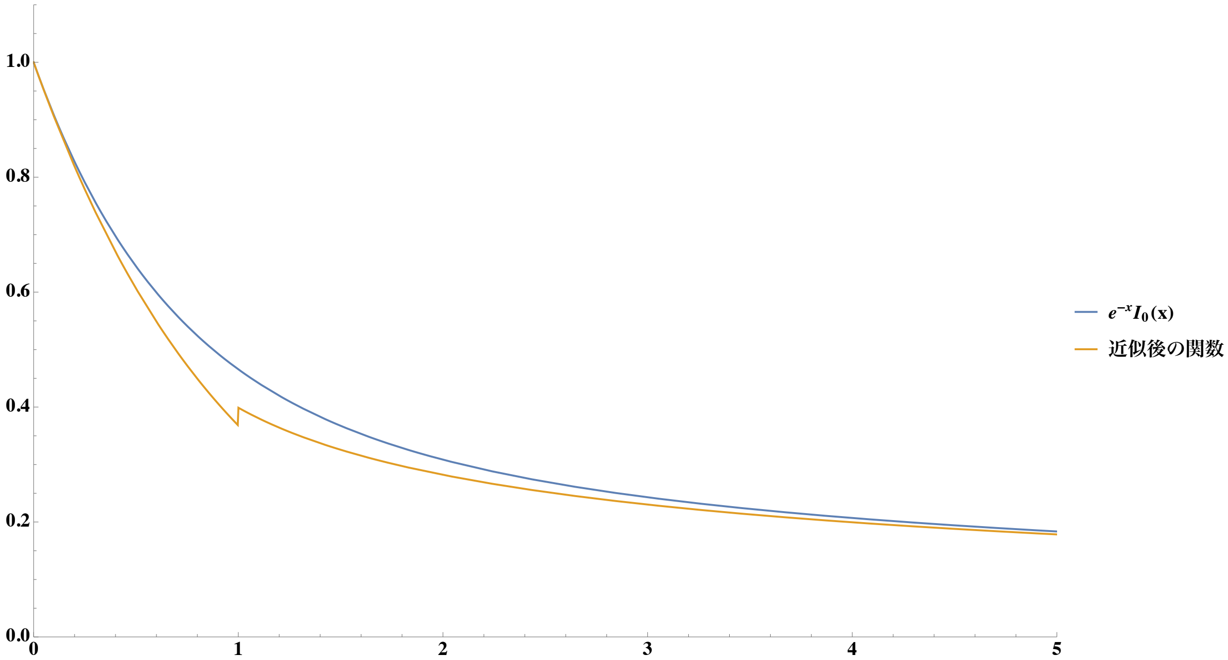

Fig. 1: 関数 $e^{-x}I_0(x)$ と近似 (50) を適用した関数の比較

この近似を積分に適応すると、

$$\int_0^\infty dt\ e^{-Nt}\{I_0(t)\}^N = \int_0^1 dt\ e^{-Nt}\{I_0(t)\}^N + \int_1^\infty dt\ e^{-Nt}\{I_0(t)\}^N \tag{51}$$

$$\sim \int_0^1 dt\ e^{-Nt} + \frac{1}{(2\pi)^{N/2}}\int_1^\infty dt\ t^{-N/2} \tag{52}$$

$$= \frac{1-e^{-N}}{N} + \frac{1}{(2\pi)^{N/2}}\left[\frac{t^{-(N/2-1)}}{1-N/2}\right]_1^\infty \tag{53}$$

と評価出来る。ここから、積分が発散するのは $N = 1, 2$ のときとわかる。つまり、RW で原点に戻ってこれるのは 1 次元と 2 次元の時だけである。

また、N を実数次元を解釈すると、2 次元の場合がちょうど確率が 1 を割るかどうかの threshold になっている、とも理解できる。勿論、より厳密に評価すると $N = 2$ から微妙にズレる可能性はあるが、それでも 2 次元 RW の帰還確率が 1 であることから、$N = 2 + \varepsilon$ 程度のところに threshold があると推測できる。

なお、上の漸近的な評価が有限となる時、積分は

$$\int_0^\infty dt\ e^{-Nt}\{I_0(t)\}^N = \frac{1-e^{-N}}{N} + \frac{2(2\pi)^{-N/2}}{N-2} \tag{54}$$

と評価出来るように見えるが、近似としてはかなり悪い。例えば、この近似で 3 次元 RW の帰還確率を評価すると $p \sim 0.248784$ となるが、これは真の確率と比較して

10% 程度も確率がズレてしまっている。この誤差は N が大きくなるほど酷くなる[*4]。あくまでも、積分が発散するかどうかの判定として近似したに過ぎない。

AppendixA　おまけ：帰還確率のプロット

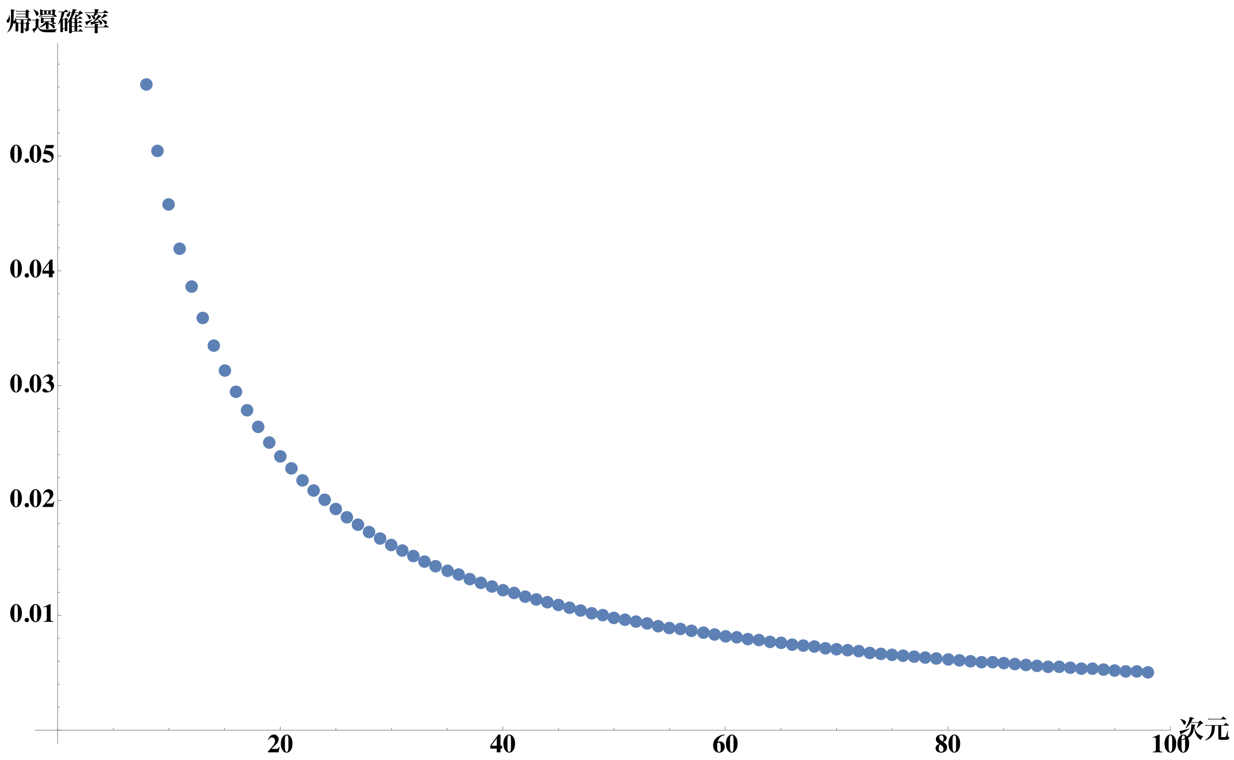

Fig. 2: N 次元 RW の帰還確率

References

[GR43] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, 1943.

---

*4 $N=9$ でほぼ誤差 100% になった…