

Точные решения задачи случайного блуждания по 2-х и 3-х мерным простым кубическим решёткам в виде комбинаторных выражений.

А.В.Антипин

a1_mail@inbox.ru

Получены комбинаторные формулы, описывающая случайные блуждания по простой кубической решётке. Для случая 2-х измерений - точная и простая. Для случая 3-х измерений - точная, но, к сожалению, не компактная.

A.V. Antipin

Exact solution of the problem of random walks on 2-and 3-dimensional simple cubic grids in the form of combinatorial expressions.

The obtained combinatorial formulas describing random walks on a simple cubic grid.

For the case of 2 dimensions - accurate and simple.

For the case of 3 dimensions - accurate, but, unfortunately, not compact.

Простая кубическая решётка определяется как набор узлов - местоположений конца N -мерного вектора

$$\mathbf{k} = n_1 \cdot \mathbf{k}_1 + n_2 \cdot \mathbf{k}_2 + \dots + n_N \cdot \mathbf{k}_N,$$

где \mathbf{k}_i – направляющие, взаимно перпендикулярные единичные вектора, а n_i - пробегает все возможные целые значения: $0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$. Моделью решётки в 1-мерном случае служит ось X с узлами в своих целочисленных значениях, в 2-х мерном случае – это "листок в клеточку", в 3-х мерном – это кубическая решётка и т.д.

Задача случайного блуждания по решёткам ставится следующим образом: пусть в момент $L=0$ "блуждающая точка" помещается в начало координат $(0,0,0,\dots)$. Какова вероятность $P_L(X, Y, Z, \dots)$, что на шаге L точка окажется в узле (X, Y, Z, \dots) с учётом того, что:

- все значения X, Y, Z, \dots и L - произвольные целые числа ≥ 0 ,
- точка за один шаг случайным образом перемещается в один из узлов, смежный текущему,
- вероятность этого перехода является константой решётки и обратно пропорциональна числу смежных узлов. (Т.о. эта вероятность равна $\frac{1}{2}$ для прямой, $\frac{1}{4}$ для плоскости, $\frac{1}{6}$ в случае 3-х измерений и, в общем случае, $P = \frac{1}{2N}$, где $N = 1, 2, 3, \dots$ - размерность пространства в "общепринятом" смысле.)

Известно [1] решение данной задачи в общем виде для случая любой размерности:

$$P_L(\mathbf{k}) = P_L(k_1, k_2, \dots, k_N) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{-\pi}^{\pi} \dots \int_{-\pi}^{\pi} \frac{1}{N} (c_1 + c_2 + \dots + c_N)^L \cdot \exp(-i\varphi \cdot \mathbf{k}) d^N \varphi,$$

где $c_j = \cos \varphi_j = \frac{1}{2} [\exp(i\varphi_j) + \exp(-i\varphi_j)]$; $\varphi \cdot \mathbf{k} = \varphi_1 k_1 + \dots + \varphi_N k_N$; а $d^N \varphi = d\varphi_1 \cdot \dots \cdot d\varphi_N$.

Однако, для конкретных расчётов и оценок, всегда желательно иметь простые выражения. Для одномерного случая такое простое решение известно и даётся следующей комбинаторной формулой. Вероятность того, что на L -ом шаге точка окажется в узле с координатой X есть:

$$P_L(X) = \left(\frac{1}{2} \right)^L * \binom{L}{X}$$

где L - номер "шага", X - координата узла. Символ $\binom{a}{b}$ в правой части означает $\frac{a!}{b!(a-b)!}$, где $b!$ – факториал.

Нами были получены аналогичные решения в виде комбинаторных формул: точное и простое для случая 2-х измерений и точное, но «тяжёлое» для 3-х измерений.

В основу вывода была положена очевидная связь между вероятностью попадания на шаге L в любой из достижимых к этому шагу узлов решётки и числом траекторий, ведущих в него (заканчивающихся в нём).

Очевидно, что вероятность $P_L(X, Y, Z, \dots)$ попадания в данный узел, вычисляется делением (нормировкой) числа траекторий $K_L(X, Y, Z, \dots)$, приводящих в него же, на сумму числа ВСЕХ возможных траекторий по всей решётке на этом же шаге.

Т.к., на каждом шаге точка может совершить единичный скачок по $2N$ разным направлениям к любому из соседних $2N$ узлов, то очевидно, что сумма числа ВСЕХ возможных траекторий по всей решётке на шаге L равна $(2N)^L$. Заметим, при этом, что ВСЕ траектории на шаге L имеют одинаковую длину, равную L , т.к. за один шаг точка может переместиться только в смежный узел, т.е. на "единицу". Уточним, что под длиной траектории понимается не декартово расстояние от начала координат до данного узла, а именно набранная сумма единичных перемещений за L шагов и, т.о., длина траектории равна $1 * L$.

Подсчёт числа траекторий, ведущих в конкретный узел - это достаточно прозрачный итерационный процесс, основанный на том наблюдении, что попасть в узел A на шаге L можно только из одного из смежных узлов. Поэтому число траекторий, ведущих в узел A на шаге с номером (L) , есть сумма числа траекторий, ведущих во ВСЕ СМЕЖНЫЕ ЕМУ узлы, но на ПРЕДЫДУЩЕМ шаге с номером $(L-1)$.

В соответствие с описанным алгоритмом для шагов L в диапазоне от 1 до 20-30 были насчитаны числовые таблицы для числа траекторий, ведущих в соответствующие узлы (для первого квадранта в случае 2-х измерений и для первого октанта при 3-х измерениях).

Обнаружилось, что в этих таблицах все числа, как лежащие на прямых, параллельных осям, так и на диагональных прямых, можно представить, в виде членов однотипных прогрессий. Эти прогрессии оказались аналогами прогрессии, описывающей биномиальные коэффициенты.

Расписав прогрессии в явном виде и проанализировав их коэффициенты удалось, далее, построить из этих коэффициентов арифметические прогрессии порядка M . Напомним, что арифметической прогрессией порядка M , называется арифметическая прогрессия, M -е разности d_M которой постоянны: см., в частности, номер 29 в [2]. Как M , так и разности построенных прогрессий, оказались индивидуальными величинами для каждой конкретной последовательности.

Далее, процесс анализа и построения новых последовательностей (из коэффициентов предыдущих), повторялся, насколько это оказалось возможным. Такое повторение приводило ко всё более плотной свёртке уже полученных прогрессий в прогрессии следующих уровней обобщения.

Для пояснения того, как в таблице исходно выделяются указанные прогрессии, рассмотрим простейший случай для 2-х измерений.

На каждом шаге, траектории длиной L заканчиваются не в любых, а только в определённых узлах. Эти узлы, естественно, окружают начало координат. Например, на шаге L , узел с координатой $(x=L, y=0)$ уже достигается, хотя и только одной траекторией (прямая вдоль оси X длиной L), а узел $(x=(L+1), y=0)$ на этом шаге – ещё не достигается. Т.о., для шага L числа в таблице оказываются равны: для узла $(x=L, y=0)$ - число траекторий, заканчивающихся в узле, равно 1, а для узла $(x=(L+1), y=0)$ число равно 0.

На каждом текущем шаге будем называть узлы, в которых оканчивается хотя бы одна траектория, заполненными, а узлы, для которых число оканчивающихся в них траекторий равно 0 – пустыми.

Заполненная часть таблицы зрительно выглядит, как расширяющийся от начала координат с каждым шагом L , квадрат (или правильный ромб). Мы будем считать, что это квадрат. Этот квадрат ограничен своими «внешними» сторонами. «Внешние стороны» являются прямыми, наклонёнными по углом 45 градусов к осям X и Y . За этими прямыми, вне их, «в сторону бесконечности», лежат исключительно пустые узлы, а собственно эти прямые образованы самими «внешними» (относительно начала координат) заполненными узлами.

Возвращаемся к примеру. Оказалось, в частности, что числа, образующие эти внешние стороны, являются членами общеизвестной прогрессии. Эта прогрессия есть почленная роспись биномиальных коэффициентов степени L . Конкретнее: для $L=3$ «внешняя» сторона квадрата образована числами $1 - 3 - 3 - 1$, для $L=4$: $1 - 4 - 6 - 4 - 1$, для $L=5$: $1 - 5 - 10 - 10 - 5 - 1$ и т.д.

Далее, как уже упоминалось, неоднократными свёртками частных формул, описывающих различные обнаруженные прогрессии, этот процесс (свёртки) удалось довести до конца в случае 2-х мерной решётки. Было получено следующее выражение для ЧИСЛА ТРАЕКТОРИЙ, ведущих в данный узел (X, Y) на шаге L :

$$K_L(X, Y) = \left(\frac{L + X + Y}{2} \right) * \left(\frac{L + X - Y}{2} \right)$$

И, т.о., для случая 2-х мерной решётки окончательное решение задачи случайного блуждания имеет простой вид:

$$P_L(X, Y) = \left(\frac{1}{4^L} \right) * \left(\frac{L + X + Y}{2} \right) * \left(\frac{L + X - Y}{2} \right)$$

где $P_L(X, Y)$ - вероятность того, что на шаге номер L точка окажется в узле с координатами (X, Y) , а символ $\binom{a}{b}$ в правой части, как и раньше, означает: $\frac{a!}{b!(a-b)!}$.

Для случая 3-х мерной решётки свёртку удалось довести только до предпоследней стадии, а именно:

$$P_L(X, Y, Z) = \left(\frac{1}{6^L} \right) * \sum_{j=0}^{L-(X+Y+Z)} \left\{ \binom{L}{X+j} * \binom{L-(X+j)}{j} * \left(\frac{L-X-2j}{(L-X-2j)-(Y+Z)} \right) * \left(\frac{L-X-2j}{(L-X-2j)-(Y-Z)} \right) \right\}$$

где величины P, L, X, Y, Z – аналогичны предыдущим случаям, а j – технический индекс текущего суммирования.

Заметим, что в силу полной симметрии осей, очевидно, что результат не меняется при замене X на Y (или Z) и, соответственно, Y (или Z) на X . Автор считает, что это наблюдение, возможно, поможет завершению свёртки и получению компактной и простой формулы.

С другой стороны, известно, что если для $N=1$ и 2 движение возвратно (т.е. блуждающая точка с вероятностью= 1 возвращается в начало координат), то для всех $N \geq 3$, это не так - движение невозвратно. Например, для нашего случая простой объёмной решётки, вероятность возвращения в начало координат имеет значение $p = 0,3405\dots$ [1]. Возможно, именно этот факт и не позволил автору получить выражение более простого вида для $N = 3$.

Т.о., для случая 2-х измерений получена ПРОСТАЯ комбинаторная формула, описывающая случайные блуждания по решётке. Для случая же 3-х измерений формула ТОЧНА, но, к сожалению, не компактна.

Литература:

1. Эллиот В. Монрол в сб. Прикладная комбинаторная математика, ред. Э.Беккенбаха, М., Мир, 1968, стр. 11.
2. Двайт Г.Б., Таблицы интегралов, М., Наука, 1973, стр.12.