公開：2014 年 6 月 11 日
最終更新日：2014 年 6 月 13 日

2 次元ランダムウォークの再帰時間の確率分布について

田崎晴明

講義では 1 次元ランダムウォーク（以下、RW と略す）の再帰時間の確率分布を導いた。ここでは、2 次元での対応する結果 (19) を導く。ついでに（というのも何だが)、一般的な RW の再帰性の判定基準を導出し、3 次元以上での RW が非再帰的であることを示す[*1]。

なお、ここでは測度論に基づく確率論はいっさい用いず、(有限状態を扱う）初等的な確率論だけで話を進める。それでも以下の議論はすべて厳密である（と思う)。

1　一般的な不等式

一般的な設定で基本的な不等式を導く。

■定義　Λ を任意の無限格子とし、格子点を $x, y, \ldots \in \Lambda$ と書く。一般的な RW を定義するため、$x, y \in \Lambda$ に対して x から y への遷移確率 $p_{x\to y} \geq 0$ が定まっており、任意の x に対して $\sum_y p_{x\to y} = 1$ が成り立つとする[*2]。

x から y への遷移確率が $p_{x\to y}$ とは、時刻 s に格子点 x にいた粒子は時刻 $s+1$ には確率 $p_{x\to y}$ で格子点 y にいるということ。あるいは、時刻 0 で x_0 にいた粒子が経路 $\boldsymbol{x} = (x_0, x_1, \ldots, x_n)$ を辿る確率が $\prod_{s=1}^{n} p_{x_{s-1}\to x_s}$ だと言ってもいい。

時刻 0 に x にいた粒子が時刻 $s = 0, 1, 2, \ldots$ に同じ x にいる確率を $P_{x\to x}(s)$ と書く[*3]。$s = 0$ についてはもちろん $P_{x\to x}(0) = 1$ である。また、時刻 0 に x にいた粒子が、いったん x を離れた後、時刻 $s = 2, 3, \ldots$ に初めて x に戻ってくる確率を $F_{x\to x}(s)$ とする。

---

*1 これは 2014 年度の「現代物理学」の講義の資料として書いた。原則として受講者を対象にしているが、講義を受けていない人でも RW の定義を知っていれば読めると思う。ただし、1 次元 RW についてはまったく書いていないので、それは別のところで学んでほしい（講義では「原点での反転」を使って再帰時間の分布を正確に導く（愉しい）方法を話した。Feller の教科書などに載っている)。なおこのノートに書いた証明は、友人の原隆さん（九大数理）から教わった。

*2 細かい注意：さらに、任意の x に対して、有限個の y についてのみ $p_{x\to y} \neq 0$ であると仮定すると有限状態の確率論だけで話が閉じる。

*3 より一般に、時刻 0 に x にいた粒子が時刻 s に y にいる確率を $P_{x\to y}(s)$ と書くわけだが、この量は、このノートには登場しない。

■基本的な等式　時刻 0 に x にいた粒子が時刻 $s=2,3,\ldots$ にも x にいたとしよう（もちろん、この事象が生じる確率は $P_{x\to x}(s)$）。この際、粒子は一度も動かずにずっと x にいたか、あるいは、いったん x を離れた後また x に戻ったかのいずれかである。後者の場合、（いったん x を離れた後）粒子が最初に x に戻った時刻を t としよう。t は、$2\le t\le s$ の範囲の様々な値をとりうる。$t=s$ ならば時刻 s に初めて x に戻って来てそれで終わりだが、$t<s$ ならば時刻 t に初めて x に戻って来て、その後、またなんだかんだとやってから時刻 s にも x にいるということになる。

以上の考察をそのまま式にすれば、

$$P_{x\to x}(s)=(p_{x\to x})^s+\sum_{t=2}^{s}F_{x\to x}(t)\,P_{x\to x}(s-t) \tag{1}$$

となる（これがこのノートで最も重要な式なので落ち着いて絵を描いて考えてみよう）。ここで t についての和を、

$$P_{x\to x}(s)=(p_{x\to x})^s+\sum_{\substack{t\ge 2,\,u\ge 0\\(t+u=s)}}F_{x\to x}(t)\,P_{x\to x}(u) \tag{2}$$

と書き直そう。和は条件を満たす全ての整数 t,u についてとる（よって $s=1$ ならば和は 0 とする）。この等式を $s=1$ から n まで足しあげると、

$$\sum_{s=1}^{n}P_{x\to x}(s)=c_n+\sum_{\substack{t\ge 2,\,u\ge 0\\(t+u\le n)}}F_{x\to x}(t)\,P_{x\to x}(u) \tag{3}$$

という基本的な等式が得られる。もちろん

$$c_n:=\sum_{s=1}^{n}(p_{x\to x})^s\le c_\infty:=\frac{p_{x\to x}}{1-p_{x\to x}} \tag{4}$$

である。

■不等式　等式 (3) 右辺の t,u についての和の範囲は直角三角形状になっていて（よくわからない人は表にしてみるといい）、このままでは扱いにくい。

思い切って、t を 2 から n まで、u を 0 から n まで[*4]独立に足しあげることにする。すると、明らかにもともとあった項は全て足しており、さらに（ゼロ以上の）項を余分に足

[*4] u は 0 から $n-2$ まで足せば十分だが、そうしても不等式はさほど改良されない。

しているので、

$$\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s) \le c_\infty + \sum_{t=2}^{n} F_{x\to x}(t) \sum_{u=0}^{n} P_{x\to x}(u) \tag{5}$$

という不等式が得られる。整理すれば、

$$\sum_{s=2}^{n} F_{x\to x}(s) \ge \frac{-c_\infty + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)}{1 + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)} \tag{6}$$

となる。$P_{x\to x}(0) = 1$ を露わに書いた。

次に、(3) の右辺を「少なめ」に足すことを考える。これには（n を偶数として)、t を 2 から $n/2$ まで、u を 0 から $n/2$ まで足せばいい。足し損なった項はゼロ以上だから、

$$\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s) \ge c_n + \sum_{t=2}^{n/2} F_{x\to x}(t) \sum_{u=0}^{n/2} P_{x\to x}(u) \tag{7}$$

という不等式が得られる。$n/2$ を n と書き直して、整理すれば、

$$\sum_{s=2}^{n} F_{x\to x}(s) \le \frac{-c_{2n} + \displaystyle\sum_{s=1}^{2n} P_{x\to x}(s)}{1 + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)} \tag{8}$$

が得られる。

2 再帰性の判定基準

不等式 (6), (8) の応用として、RW の再帰性についての一般的な判定基準を導こう。

時刻 0 に格子点 x から出発して RW する粒子を考える。粒子が、いったん x を離れたあと、はじめて x に戻る時刻を R とする（R はランダム変数[*5])。粒子が時刻 n までに出発点 x に戻る確率は

$$\mathrm{Prob}[R \le n] = \sum_{s=2}^{n} \mathrm{Prob}[R = s] = \sum_{s=2}^{n} F_{x\to x}(s) \tag{9}$$

[*5] 細かい注意：ランダム変数 R を厳密に定義するには有限状態の確率論では（ちょっとだけ）不十分である。ただし、以下で考える事象 $R \le n$ は時刻 0 から時刻 n までの RW を考えれば真偽が定まるので、有限状態の確率論だけで厳密に定義されている。

である。よって、(6), (8) より、

$$\frac{-c_\infty + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)}{1 + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)} \le \mathrm{Prob}[R \le n] \le \frac{-c_{2n} + \displaystyle\sum_{s=1}^{2n} P_{x\to x}(s)}{1 + \displaystyle\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)} \tag{10}$$

が得られる。

さて、$\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s)$ は n について非減少である。よって、$n \uparrow \infty$ のとき、この和は収束するか、無限大に発散するかのいずれかである。

まず

$$\lim_{n\uparrow\infty} \sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s) = \infty \tag{11}$$

だとしよう。講義でも述べたように、左辺は粒子が格子点 x を訪れる回数の期待値と解釈できる。(11) が成り立つとき、(10) の最左辺は $n \uparrow \infty$ で 1 に収束する。一方、$\mathrm{Prob}[R \le n] \le 1$ は必ず成り立つから、

$$\lim_{n\uparrow\infty} \mathrm{Prob}[R \le n] = 1 \tag{12}$$

である。左辺を「無限に長いあいだ待ったとき RW する粒子が出発点 x に戻ってくる確率」と解釈しよう。すると、この場合には RW する粒子は（無限に待てば）確実に出発点 x に戻ってくるということになる。このような RW は**再帰的**であるという。

次に、

$$\lim_{n\uparrow\infty} \sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s) = C < \infty \tag{13}$$

のように、粒子が格子点 x を訪れる回数の期待値が有限の値に収束するとしよう。このときには (10) に登場する和はすべて $n \uparrow \infty$ で C に収束するので、

$$\lim_{n\uparrow\infty} \mathrm{Prob}[R \le n] = \frac{C - c_\infty}{C + 1} < 1 \tag{14}$$

が得られる。どれほど長いあいだ待っても RW が出発点に戻る確率が 1 よりも小さいままということだ。つまり、「無限に長いあいだ待っても、RW する粒子は出発点の x には戻って来ない」ということが有限の確率でおきるのである。このような RW は**非再帰的**という。

まとめれば、**粒子が出発点を訪れる回数の期待値が無限大か有限かによって、RW が再帰的か非再帰的かが完全に決まる**ことが示された。

3　2 次元 RW の再帰時間の確率分布

本題の 2 次元の RW について考えよう。舞台を正方格子 $\mathbb{Z}^2$ とし、格子点を $x = (i, j)$ と書く（もちろん、$i, j \in \mathbb{Z}$)。もっとも単純な（そして基本的な）RW を考えることにして、遷移確率を

$$p_{x \to y} = \begin{cases} 1/4 & x \text{ と } y \text{ の距離が } 1 \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \tag{15}$$

と取る。確率 1/4 で上下左右のいずれかの方向に距離 1 だけ動くということだ。

さて、粒子の位置 (i, j) が上の遷移によって変化するとき、$i + j$ および $i - j$ は以下の表のように変化することに注意しよう。

(i, j) の変位	$i + j$ の変位	$i - j$ の変位
$(1, 0)$	$+1$	$+1$
$(-1, 0)$	-1	-1
$(0, 1)$	$+1$	-1
$(0, -1)$	-1	$+1$

これら四つの場合がそれぞれ確率 1/4 で現れる。よって、$i + j$ も $i - j$ も確率 1/2 で 1 増えるか減るかだということがわかる。さらに、上の表を見れば、$i + j$ と $i - j$ の変化が完全に独立であることも読み取れる。つまり、この 2 次元での RW は、二つの独立な 1 次元 RW に（厳密に）分解できるということだ。

特に、時刻 0 に原点 $(0, 0)$ を出発した粒子が時刻 s にも原点にいる確率は、1 次元の RW に関する確率を用いて[*6]、

$$P_{(0,0)\to(0,0)}(s) = \left\{P^{(1d)}_{0\to 0}(s)\right\}^2 = \begin{cases} \left\{\dfrac{1}{2^s}\dfrac{s!}{(s/2)!(s/2)!}\right\}^2 \simeq \dfrac{2}{\pi}\dfrac{1}{s} & s \text{ が偶数} \\ 0 & s \text{ が奇数} \end{cases} \tag{16}$$

となることがわかる。後半は（講義で見た）1 次元の RW の結果を用いた[*7]。よって、時

[*6] より一般に $P_{(0,0)\to(i,j)}(s) = P^{(1d)}_{0\to i+j}\, P^{(1d)}_{0\to i-j}$ がいえる。

[*7] Stirling の公式の誤差を真面目に評価せず $\simeq$ ですませてしまった。少しだけ厳密さに欠ける部分である。真面目にやるには全て不等式にして評価する（面倒だがそれほど難しくはないはず)。

刻 n までに粒子が $(0,0)$ を訪れる回数の期待値は

$$\sum_{s=1}^{n} P_{(0,0)\to(0,0)}(s) \simeq \frac{1}{\pi}\int_1^n ds\,\frac{1}{s} = \frac{\log n}{\pi} \tag{17}$$

と評価できる。右辺は $n\uparrow\infty$ で無限大に発散するので、2 次元の RW は再帰的であることがわかる。

さらに、再帰時間の確率分布をみるため、(17) を不等式 (10) に代入する。$n \gg 1$ では、$\log(2n) = \log 2 + \log n \simeq \log n$ となることから、最左辺と最右辺はほぼ等しく*8、

$$\mathrm{Prob}[R \le n] \simeq \frac{(\log n)/\pi}{1+(\log n)/\pi} = \frac{1}{1+\pi/\log n} \simeq 1 - \frac{\pi}{\log n} \tag{18}$$

となる（$c_n = 0$ に注意)。よって、$n \gg 1$ では

$$\mathrm{Prob}[R > n] := 1 - \mathrm{Prob}[R \le n] \simeq \frac{\pi}{\log n} \tag{19}$$

が得られた。やはり再帰的な 1 次元の RW では $\mathrm{Prob}[R > n] \simeq \sqrt{2/\pi}\, n^{-1/2}$ だったことを思い出すと、2 次元での $\mathrm{Prob}[R > n]$ の減衰がきわめてゆっくりであることがわかる。再帰的とは言っても、ものすごく長い時間をかけて出発点に戻ってくるのだ。

4　3 次元以上での RW の非再帰性

最後に 3 次元以上での RW が非再帰的であることを見る。

次元を $d = 1, 2, 3, \ldots$ と書き、RW の舞台を d 次元の超立方格子 $\mathbb{Z}^d$ とする。格子点 $x \in \mathbb{Z}^d$ は $x = (i_1, \ldots, i_d)$ と成分表示できるが（もちろん $i_j \in \mathbb{Z}$)、この形は特に使わない。もっとも単純な RW の遷移確率は

$$p_{x\to y} = \begin{cases} (2d)^{-1} & x \text{ と } y \text{ の距離が } 1 \\ 0 & \text{それ以外} \end{cases} \tag{20}$$

である。

このとき、次元のみによる定数 C_d があって、

$$P_{x\to x}(s) \le C_d\, s^{-d/2} \tag{21}$$

が成り立つことを下で示す*9。もちろん、$d = 1, 2$ については既に知っている結果である。

*8 最左辺と最右辺がほぼ等しいのは 2 次元の特殊性。1 次元ではそうはならない（どうなるかやってみよう)。1 次元では講義で見た反転のテクニックがやはり強力。

*9 さらに、$s \gg 1$ なる偶数の s について $P_{x\to x}(s) \simeq \tilde{C}_d\, s^{-d/2}$ であることも証明されている。

(21) のふるまいは直感的にも容易に納得できる。時刻 0 から時刻 s の間に RW はおおよそ $\sqrt{s}$ の距離を進む。この性質はどの次元でも成り立つし、簡単に示すことができる。出発点からの距離が $\sqrt{s}$ 以下の格子点の総数はおおよそ $s^{d/2}$ である。時刻 s には、これらの点のいずれかにほぼ等確率でいるとすると、そのうちの一点である出発点にいる確率はほぼ $1/s^{d/2}$ と考えられる。

不等式 (21) を認めれば、$d \geq 3$ では、

$$\sum_{s=1}^{n} P_{x\to x}(s) \leq C'_d \int_1^n ds\, s^{-d/2} \leq \frac{C'_d}{(d/2)-1} < \infty \tag{22}$$

となる（C'_d は適当な定数)。前に求めた判定基準から、RW は非再帰的とわかる[*10]。

■不等式 (21) **の導出**　2 次元の RW は二つの 1 次元 RW に分解できたのだが、3 次元以上では同じことはできない（なぜか考えてみよう)。真面目に場合の数を計算するしかない。s を偶数として $P_{x\to x}(s)$ を評価しよう。

$s = 2m$ と書く。まず、各々の軸方向に移動するステップ数を考える。$2m$ ステップの内、RW が j 番目の軸に沿って動いたステップ数を $2\ell_j$ とする。明らかに $\sum_{j=1}^{d} \ell_j = m$ である。ここで、$2\ell_1, 2\ell_2, \ldots, 2\ell_d$ ステップを全体の $2m$ ステップの中にどう割り当てるかの場合の数は、

$$\frac{(2m)!}{(2\ell_1)!\,(2\ell_2)!\cdots(2\ell_d)!} \tag{23}$$

である。また、j 軸方向だけの動きを考えたとき、$2\ell_j$ ステップを正と負の方向への ℓ_j ステップに割り振るやり方は

$$\frac{(2\ell_j)!}{(\ell_j!)^2} \tag{24}$$

である。さいごに、$2m$ ステップの任意の経路が出現する確率は $1/(2d)^{2m}$ だから、求め

[*10] ちなみに RW が決して出発点に戻って来ない確率 $\lim_{n\uparrow\infty} \mathrm{Prob}[R \leq n]$ は、$d = 3$ なら約 0.34、$d = 4$ なら約 0.19 であり、$d = 10$ ではわずか約 0.056 だそうだ（原隆さんの講義ノートから書き写した（コピペではない！))。

る確率は、

$$
\begin{aligned}
P_{x\to x}(n) &= \sum_{\substack{\ell_1,\ldots,\ell_d\ge 0\\ (\sum_j \ell_j = m)}} \frac{1}{(2d)^{2m}}\,\frac{(2m)!}{(2\ell_1)!\cdots(2\ell_d)!}\,\frac{(2\ell_1)!\cdots(2\ell_d)!}{(\ell_1!)^2\cdots(\ell_d!)^2}\\
&= \sum_{\substack{\ell_1,\ldots,\ell_d\ge 0\\ (\sum_j \ell_j = m)}} \frac{1}{(2d)^{2m}}\,\frac{(2m)!}{(\ell_1!)^2\cdots(\ell_d!)^2}\\
&\le \frac{1}{(2d)^{2m}}\,\frac{(2m)!}{m!}\,\frac{1}{F_m}\sum_{\substack{\ell_1,\ldots,\ell_d\ge 0\\ (\sum_j \ell_j = m)}} \frac{m!}{\ell_1!\cdots\ell_d!}\\
&= \frac{1}{2^{2m}\,d^m}\,\frac{(2m)!}{m!}\,\frac{1}{F_m} \qquad (25)
\end{aligned}
$$

と評価できる。3 行目の和は d^m であることを用いた[*11]。ここで、

$$F_m := \min_{\substack{\ell_1,\ldots,\ell_d\ge 0\\ (\sum_j \ell_j = m)}} \ell_1!\,\ell_2!\,\cdots\,\ell_d! \qquad (26)$$

と定義した。この最小値を求めるのは簡単で、$\ell_1,\ldots,\ell_d$ がなるべく均等になるように選んでやればいい。特に m が d の倍数ならば、

$$F_m = \left\{\left(\frac{m}{d}\right)!\right\}^d \qquad (27)$$

である。m が d の倍数でないときには $m = \ell d + r$（ただし $1 \le r < d$）と書けば、

$$F_m = (\ell!)^{d-r}\left\{(\ell+1)!\right\}^r \qquad (28)$$

となる。

簡単のため、m が d の倍数の場合だけをみよう（他の場合も同様にできる）。(25) に

[*11] $d^m = (1+1+\cdots+1)^m$ と書いて右辺を形式的に展開すればわかる。

(27) を代入し Stirling の公式 $n! \simeq \sqrt{2\pi n}\,(n/e)^n$ を用いると[*12]、

$$
\begin{aligned}
P_{x\to x}(s) &\le \frac{1}{2^{2m}\,d^m}\;\frac{(2m)!}{m!}\;\frac{1}{\left\{\left(\dfrac{m}{d}\right)!\right\}^d} \\
&\simeq \frac{1}{2^{2m}\,d^m}\;\frac{\sqrt{4\pi m}\left(\dfrac{2m}{e}\right)^{2m}}{\sqrt{2\pi m}\left(\dfrac{m}{e}\right)^{m}}\;\frac{1}{\left\{\sqrt{\dfrac{2\pi m}{d}}\left(\dfrac{m}{de}\right)^{m/d}\right\}^d} \\
&= \sqrt{2}\left(\frac{d}{\pi}\right)^{d/2} s^{-d/2} \qquad (29)
\end{aligned}
$$

となり、求める評価が得られた。

[*12] ここも少し厳密さを欠くが、真面目にやるのは難しくない。