

## 規格化したランダム・ウォーク・シミュレーション\*

石 柁 正 士\*\*

## 1. ま え が き

解析的解決が困難な問題の数値解を求める実験的方法にモンテカルロ法があるが、これは問題の解に対応する期待値(平均値)をもつような確率過程が知られているときに適用することができる一種の確率論的数値計算法である。

この方法でたとえば拡散の方程式(熱伝導形偏微分方程式)の初期値問題、この式から導かれる Laplace, Poisson 両方程式の境界値問題、変数分離を行なって得られる Helmholtz の方程式の固有値問題のうちで、解析的解決が困難な、境界の形に任意性がある問題の数値解を得るのに、拡散の方程式と関連をもつ Brown 運動の確率過程が注目され、Brown 運動を行なう粒子の時刻と空間位置とを指定したとき、その位置へ粒子が到達する確率(あるいは確率密度)を表わす関数が本質的に拡散の方程式を満足することを利用した数値模型を用いるのである。この場合なんらかの形で Brown 運動を模擬しなければならないが、一般に取り扱いが簡単な規格化したランダム・ウォーク・シミュレーションが行なわれている。

ここでは規格化したランダム・ウォーク・シミュレーションによる拡散の方程式の数値模型を確率論の立場から検討して、解くべき方程式の係数とシミュレーションにおけるパラメータとの関連を再考した。さらに従来から用いられているランダム・ウォーク・シミュレーションの改良形を考案したのでそれらについて報告する。なおこのシミュレーションはデジタル形電子計算機でも行ない得るが、筆者らは主として電子式論理回路を用いた自動の専用シミュレータ(三次元ランダム・ウォーク装置と呼んでいる)を製作し、これを用いて実験を行なっている<sup>1)</sup>。

## 2. Brown 運動と拡散の方程式との関連

まず Brown 運動が空間的に一様でしかも定常確率

過程でかつ Markov 過程をとるものとする。以下簡単のため一次元空間で考える。時刻  $t=0$  において空間位置  $x_0$  を出発した粒子が時間  $t$  ののちに位置  $x$  に到達する確率を表わす関数を  $U(x|x_0, t)$ 、また位置  $x'$  に到達している粒子が微小時間  $dt$  の間に位置  $x$  へ移る遷移確率密度を  $\omega(x|x', dt)$  と表わすと、Markov 過程の時間的推移を表わす Chapman-Smoluchovski の方程式\*は次式のように与えられる<sup>2)</sup>。

$$U(x|x_0, t+dt) = \int U(x'|x_0, t)\omega(x|x', dt)dx' \quad (1)$$

ただし  $\omega(x|x, dt)dx=0$  であるとし、 $dt$  が十分小さいときは Fokker-Planck の方程式が得られる<sup>2)</sup>。

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + E \frac{\partial U}{\partial x} \quad (2)$$

ただし次式の関係が成り立つものとし、 $D, E$  は定数とする。

$$\int \omega(x|x', dt)dx' = 1 \quad (3)$$

$$\frac{1}{dt} \int (\pm dx)\omega(x|x', dt)dx' = E \quad (4)$$

$$\frac{1}{dt} \int dx^2 \omega(x|x', dt)dx' = 2D \quad (5)$$

空間的に一様でかつ等方的な運動では(5)式は次式のような拡散の方程式となる<sup>3)</sup>。

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \quad (6)$$

この関数  $U$  は別に粒子の到達確率の分布からも定めることができ、(6)式の解となっていることも明らかにされている<sup>4)</sup>。

一方、決定論的には拡散する物質の濃度を表わす関数を  $C$  とすると次式が成り立つ<sup>5)</sup>。

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D \text{grad } C) \quad (7)$$

$D$  を定数とすると(7)式は(6)式のように表わすことができる。ここに  $D$  は拡散係数と呼ばれる。

(6)式と(7)式とが根本的に異なる点は、関数  $U$  は一つの粒子のある時刻のある位置における存在確率(あるいは確率密度)を表わすのに対し、関数  $C$  はある時刻のある位置における濃度を表わすということであ

\* Normalized Random Walk Simulation, by Tadashi Ishiketa (Faculty of Scientific Engineering, Osaka University)

\*\* 大阪大学基礎工学部

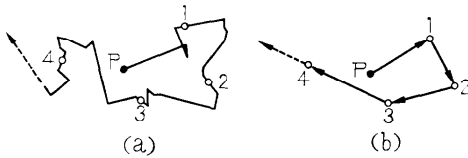
\* Kolmogorov-Chapman の方程式ともいう。

る。したがって以上の相違点を十分考慮して、Brown 運動を行なう粒子の到達確率を実験的に（シミュレーションによって）求めると、拡散の方程式を満足する関数の数値を得ることができることを示している。なお以上の所論は二次元および三次元の場合にも拡張できる。

### 3. 規格化したランダム・ウォーク・シミュレーション

#### 3.1 規格化について

ここでは図的表示が便利のように二次元空間で考える。第1図 (a) に Brown 運動の一例を示す。この



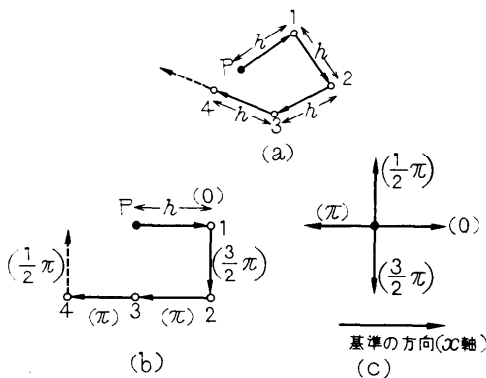
第1図 Brown 運動の一例

運動の平均自由行程を  $\lambda$  とすると、粒子が直進する距離  $l$  の密度関数  $p(l)$  は次式で与えられる。

$$p(l) = \frac{1}{\lambda} e^{-\frac{l}{\lambda}} \quad (8)$$

粒子の運動の方向は  $(0, 2\pi)$  で一様に分布し、角度  $\theta$  をとる密度関数を  $p(\theta)$  で表わす。粒子はある速度分布（たとえば Maxwell 分布）に従っていて一例として微小な単位時間  $dt$  ごとに到達している粒子の位置は同図の○印で示したようになる。

ここでこの運動を模擬する場合  $dt$  を無限に小さくとして各  $dt$  ごとの粒子の位置をとるような運動でもってこれを模擬することは困難でもあり、また履歴効



第2図 規格化したランダム・ウォークの一例と方向の定め方

果<sup>6)</sup>も考慮しなければならないから、 $dt$  ごとの運動がまったく独立であるとみなしうる大きさの  $dt$  をとり、同図 (b) に示すような単位時間ごとの位置あるいはベクトル量でもって粒子の運動の模擬を行なうことが考えられるが、さらに簡単化のため第2図 (a) に示すように粒子の行程（ベクトル量）はすべて一定の値すなわち距離  $h$  だけをとるように考える。このとき粒子の速度は  $h/dt$  なる一定速度だけをとることになる。この場合粒子の運動の方向は  $(0, 2\pi)$  で一様に分布しているから方向に関して連続量を取り扱わなければならない。そこで次のように運動の方向を互いに直交する4方向（一次元では2方向、三次元では互いに直交する6方向）に限定する。この場合の運動の方向の表示は、同図 (c) に示すように基準の方向をたとえば  $xy$  直交座標では  $x$  軸方向にとり、それから測ろうとするベクトルまで反時計方向にとった角度 (radian) で表わすことにする。同図 (b) にその一例を示す。

時間  $dt$  の間に直進する距離および角度の密度関数  $p_{dt}(l), p_{dt}(\theta)$  はそれぞれ次のようになる。

$$p_{dt}(l) = \delta_{dt}(l-h) \quad (9)$$

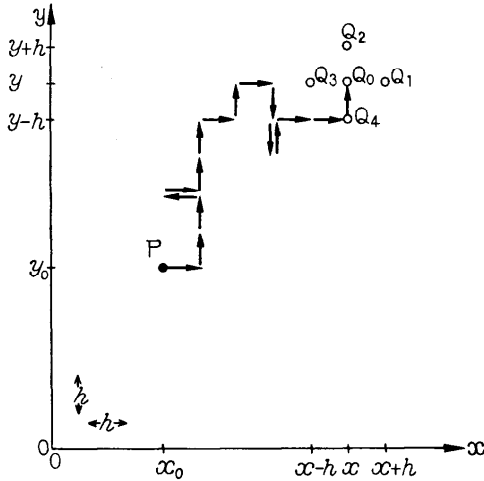
$$p_{dt}(\theta) = \frac{1}{4} \left[ \delta_{dt}(\theta) + \delta_{dt}\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + \delta_{dt}(\theta - \pi) + \delta_{dt}\left(\theta - \frac{3\pi}{2}\right) \right] \quad (10)$$

このモデルは空間に間隔  $h$  の平行線を多数引き、各格子点上に粒子をランダムに移動させることに相当し、取り扱いが簡単で従来から広く用いられているものである<sup>7)</sup>。ここではこれを従来モデルと呼ぶことにする。

#### 3.2 従来モデルにおける拡散の方程式の導出

従来モデルにおいて近似的に拡散の方程式が成り立つことは差分法によって示されている<sup>8)</sup>。第3図に二次元の場合のランダム・トリップの一例を示す。点  $P(x_0, y_0)$  は出発点、点  $Q_0(x, y)$  は到達点を示す。点  $P$  を時刻  $t=0$  に出発した粒子（以下ランダム・ウォーク・ポイントと呼ぶ）が時刻  $t=t$  に点  $Q_0$  に到達する確率を表わす関数を  $U(Q_0/P, t)$  と記す。到達までに  $n$  回のステップ（第3図における→印の総数）を要し、1ステップに時間  $\tau$ （一定値）を要したとすれば、経過時間  $t$  は  $n\tau$  で示される。1ステップ移動する確率は、可能な互いに直交する4方向のうちの一つをとるのであるから各方向につきそれぞれ  $1/4$  となり、 $U(Q_0/P, n\tau)$  は

\*  $\delta$  は Dirac の関数



第3図 二次元の場合のランダム・トリップの一例

次式を満足する。

$$\therefore \frac{\partial U}{\partial t} = D \left( \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) \quad (11)$$

ただし

$$\tau = \frac{h^2}{4D} \quad \text{すなわち} \quad D = \frac{h^2}{4\tau} \quad (12)$$

なる関係が成り立つものと仮定してある。

定数  $D$  は拡散係数に相当し、(12) 式は方程式中の係数  $D$  とシミュレーションにおけるパラメータ  $\tau, h$  との関係を与えるものである。

(12) 式の根拠はこのモデルに Chapman-Smoluchovski の方程式をあてはめてはじめて明らかにされる。前述のようにこのモデルにおける密度関数  $p_{dt}(l)$  および  $p_{dt}(\theta)$  は (9) 式、(10) 式で与えられているから、(1) 式中の密度関数  $\omega$  は  $p_{dt}(l)$  と  $p_{dt}(\theta)$  の積で与えられる。

$$\begin{aligned} \omega[(x, y)/(x, y), dt] &= \delta_{dt}(l-h) \cdot \frac{1}{4} \left[ \delta_{dt}(\theta) \right. \\ &\quad \left. + \delta_{dt}\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + \delta_{dt}(\theta - \pi) + \delta_{dt}\left(\theta - \frac{3}{2}\pi\right) \right] \end{aligned} \quad (13)$$

その他の諸量は次のように与えられる。

$$dt = \tau, \quad dx = dy = h \quad (14)$$

$(x, y)'$  は  $(x+h, y), (x, y+h), (x-h, y), (x, y-h)$  のいずれかを表わす。

これらの関係を (4) 式および (5) 式に代入すると、 $x$  軸に平行な直線上で

$$E = \frac{1}{\tau} \int \int (\pm h) \delta_r(l-h) \cdot \frac{1}{4} [\delta_r(\theta) + \delta_r(\theta - \pi)] dld\theta$$

$$= \frac{1}{4}(h-h) = 0^* \quad (15)$$

$y$  軸に平行な直線上で

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{\tau} \int \int (\pm h) \delta_r(l-h) \cdot \frac{1}{4} \left[ \delta_r\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \delta_r\left(\theta - \frac{3}{2}\pi\right) \right] dld\theta \\ &= \frac{1}{4\tau}(h-h) = 0^* \end{aligned} \quad (15')$$

上式と同様にして

$$\begin{aligned} 2D &= \frac{1}{\tau} \int \int h^2 \delta_r(l-h) \cdot \frac{1}{4} [\delta_r(\theta) + \delta_r(\theta - \pi)] dld\theta \\ &= \frac{1}{4\tau}(h^2 + h^2) = \frac{2h^2}{4\tau} \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} 2D &= \frac{1}{\tau} \int \int h^2 \delta_r(l-h) \cdot \frac{1}{4} \left[ \delta_r\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) \right. \\ &\quad \left. + \delta_r\left(\theta - \frac{3}{2}\pi\right) \right] dld\theta \\ &= \frac{1}{4\tau}(h^2 + h^2) = \frac{2h^2}{4\tau} \end{aligned} \quad (16')$$

以上から

$$E = 0 \quad (17)$$

$$D = \frac{h^2}{4\tau} \quad (18)$$

(18) 式は (12) 式に一致しており、これが拡散係数とパラメータとの関係を与える根拠となっている。(18) 式の意味するところは分散が一定であるということにはかならない<sup>3,9)</sup>。

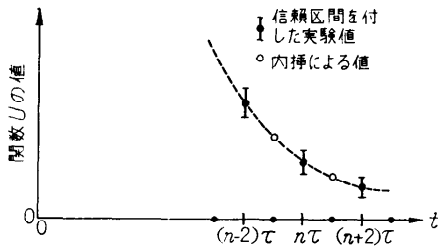
### 3.3 従来のモデルの特徴

第3図において出発点  $P$  を出たランダム・ウォーク・ポイントは点  $Q_0$  へ偶数ステップまたは奇数ステップのいずれか一方のみで到達する。すなわちこのモデルでは出発点を定めると格子点のすべては偶数ステップで到達する点と奇数ステップで到達する点とに分れてしまうのである。したがって仮に  $U(Q_0/P, n\tau) \neq 0$  とすると  $U[Q_0/P, (n \pm j)\tau]$  ( $j$ : 奇数) は常に零になる。あるいは  $U(Q_0/P, n\tau) \neq 0$  とすると点  $Q_0$  の近傍の点について  $U[Q_i/P, n\tau]$  ( $i$ : 1~4) は常に零になる。

このようなモデルでは時刻を固定して考えると空間的に、空間位置を固定して考えると時間的に一様なランダム・ウォーク・シミュレーションとはいえない。

さらに  $U(Q_0/P, n\tau) \neq 0$  とすると  $U[Q_0/P, (n \pm j)\tau]$  ( $j$ : 奇数) の値は第4図に示すように常に零となるので、これは  $\tau$  時間前後の  $U$  の値から内挿によって求め

\*  $\theta = 0$  および  $\frac{\pi}{2}$  のとき  $+h, \theta = \pi$  および  $\frac{3}{2}\pi$  のとき  $-h$  をとることは明らかである。



第4図 内挿による関数Uの値の一例

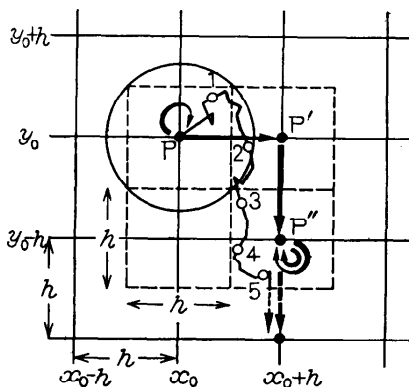
することもできるが手数がかかる。なお $\tau$ の値を十分小さくとれない場合は内挿は一層難しくなる。しかしこのモデルは時刻を考慮しない、いい換えれば定常状態における拡散の方程式すなわち Laplace の方程式のシミュレーションの場合にはなんら問題点はない。

なお従来のモデルは Laplace の差分方程式  $\Delta_h U = 0$  の数値解法の一つである Liebmann の方法の確率化とも考えられる。

#### 4. 改良形のランダム・ウォーク・モデル

##### 4.1 とどまる確率の導入

第1図(a)に示したような Brown 運動について、前章で述べた規格化の過程でシミュレーションの立場からはできるだけ制限を加えずに粒子の運動を模擬するいい換えれば粒子をできるだけ自然に近い形で運動させることが必要である。いま第5図に示すように二次元空間を間隔  $h$  の平行線(破線)で格子状の多数の正方形に分け、それぞれの中心点でこの正方形を代表させるものとする。粒子の運動に対する唯一の制限として粒子は微小時間  $\Delta t$  の間に最大  $\sqrt{2} h/2$  (同図に示した円の半径)だけの距離しか移動できないものと



第5図 改良形モデルにおけるランダム・ウォーク

する。第5図にはこのような制限の下で運動する粒子の  $\Delta t$  ごとの位置を示してあるが、この場合は  $\circ$  印が属する正方形を代表する点に存在すると考えると、すなわち粒子がある正方形内に入ると粒子はあたかもその正方形の中心に存在しているように考えると、初め点  $P$  にいた粒子は  $\Delta t$  ののちもそのまま点  $P$  に残るすなわちとどまることになる。続く  $\Delta t$  ののちに点  $P'$  へ移動することになる。

以上のように考えるとこれは次のようなモデルに置き換えることができる。すなわちランダム・ウォーク・ポイントが点  $P$  に  $\Delta t$  時間とどまる確率を  $S$  (図中  $\surd$  印で示す)、 $\Delta t$  の間に点  $P$  から4隣接点のいずれかへ移動する確率を  $r$  (図中  $\rightarrow$  印で示す) とするようなモデルである。これはあたかも従来のモデルにとどまる確率を導入したものに相当する<sup>10)</sup>(付録1参照)。

このモデルに Chapman-Smoluchovski の方程式を適用するためには、 $\omega[(x, y)/(x, y), \Delta t] dx dy = 0$  であるからこれを次式のように確率  $V[(x, y)/(x, y), \Delta t]$  を新たに導入した形にしなければならない。

$$\begin{aligned}
 &U[(x, y)/(x_0, y_0), t + \Delta t] \\
 &= \iint U[(x, y)'/(x_0, y_0), t] \omega[(x, y)/(x, y)', \Delta t] dx' dy' \\
 &\quad + V[(x, y)/(x, y), \Delta t] U[(x, y)/(x_0, y_0), t]
 \end{aligned} \tag{19}$$

確率  $V[(x, y)/(x, y), \Delta t]$  は点  $(x, y)$  にある粒子が運動を続けて  $\Delta t$  ののちに再び点  $(x, y)$  に戻るいわゆる再帰確率<sup>11)</sup>を表わすものである。この場合 (3) 式に対応して

$$\begin{aligned}
 &\iint \omega[(x, y)/(x, y)', \Delta t] dx' dy' \\
 &\quad + V[(x, y)/(x, y), \Delta t] = 1
 \end{aligned} \tag{20}$$

が成り立ち、(4) 式、(5) 式に対応して

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{\Delta t} \iint \{\pm \text{dis} [(x, y) \sim (x, y)']\} \omega[(x, y)/(x, y)', \Delta t] dx' dy' = E
 \end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{\Delta t} \iint \{\text{dis} [(x, y) \sim (x, y)']\}^2 \omega[(x, y)/(x, y)', \Delta t] dx' dy' = 2D
 \end{aligned} \tag{22}$$

が成り立つものとする。ただし  $\text{dis}[(x, y) \sim (x, y)']$  は点  $(x, y)$  と点  $(x, y)'$  の距離、 $D, E$  は定数とする。

従来のモデルにおいて (13) 式から (18) 式までの計算を行なったのと同様にこのモデルにおける関係式を求めた。まず二次元における確率  $r$  と  $s$  は次式で結

ばれていることは第5図から明らかである。

$$4r+s=1 \tag{22}$$

またこのモデルにおける密度関数ならびにとどまる確率は次式で示される。

$$\omega[(x, y)/(x, y)', \Delta t] = \delta_{\Delta t}(l-h) \cdot r \left[ \delta_{\Delta t}(\theta) + \delta_{\Delta t}\left(\theta - \frac{\pi}{2}\right) + \delta_{\Delta t}(\theta - \pi) + \delta_{\Delta t}\left(\theta - \frac{3\pi}{2}\right) \right] \tag{24}$$

$$V[(x, y)/(x, y), \Delta t] = S \tag{25}$$

簡単な計算から次の関係式が求まる。

$$E=0 \tag{26}$$

$$D = \frac{r h^2}{\tau} \tag{27}$$

(27) 式の  $r$  に (23) 式の関係式を代入すると

$$D = \frac{1-S}{4} \cdot \frac{h^2}{\tau} \tag{28}$$

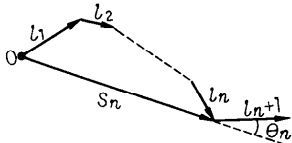
が得られる。この式が改良形モデルにおける係数  $D$  とパラメータ  $\tau, h$  との関係を与えるものである。

このモデルでは点  $P$  から点  $P''$  へ (第5図参照) 直接ランダム・ウォーク・ポイントが移動することは考えないが、実際には粒子はこのような移動を行なう可能性がある。当然ランダム・ウォーク・ポイントが斜めに移動する (たとえば点  $P$  から点  $P''$  へのように) 確率を導入したモデルも考えられるが、これを考慮すると (11) 式とは異なった式が成り立つことになる (付録2参照)。

この改良形モデルでは前述の奇数、偶数ステップの問題は生じない。

4・2 とどまる確率の大きさ

改良形モデルにおけるとどまる確率  $S$  の値の見当をつけるために、1905年に Pearson が提出した酔歩の問題に対する Kluyver の解<sup>(12)</sup> を用いて簡単な計算を行なった。



第6図 酔歩のベクトル和

第6図において酔歩の歩いた距離  $l_1, l_2, \dots, l_n$  のベクトル和を  $S_n$  とし、 $S_n$  と次の  $l_{n+1}$  とのなす角を  $\theta_n$  とすると、 $\theta_n$  は  $(-\pi, \pi)$  で一様に分布すると仮定する。点  $O$  を出発した酔歩が  $l_n$  を歩き終ったとき、点  $O$  を中心とする半径  $R$  の円内にいる確率を  $P_n(R; l_1, l_2, \dots, l_n)$  と表わすと、これは次式のよりに求められている<sup>12)</sup>。

$$P_n(R; l_1, l_2, \dots, l_n) = R \int_0^\infty J_1(Rt) J_0(l_1 t) \dots J_0(l_n t) dt \tag{29}$$

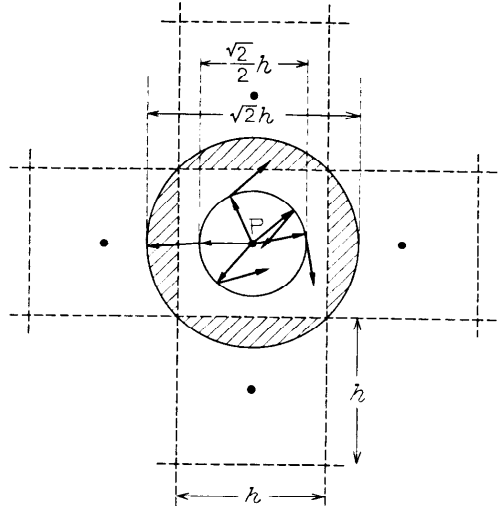
ただし  $J$  は Bessel 関数である。

さらに簡単に  $l_n$  をすべて一定値  $l$  とすると

$$P_n(R; l, l, \dots, l) = R \int_0^\infty J_1(Rt) [J_0(lt)]^n dt \tag{30}$$

特に  $R=l$  のときは

$$P_n(l; l, l, \dots, l) = \frac{1}{n+1} \tag{31}$$



第7図 一定の歩幅の酔歩一例

第7図に、第5図に示した半径  $\sqrt{2}h/4$  の円の近傍を示してあるが、この場合のとどまる確率  $S$  とは点  $P$  を出発した粒子が  $\Delta t$  のうちにこの円に内接する正方形内に見出される確率に等しいと考えられる。そこで点  $P$  に酔歩を置き、歩幅  $l$  を仮に半径の  $1/2$  すなわち  $\sqrt{2}h/4$  にとり、同図に示すようにでたらしめの向きに2歩歩かせるとき、この酔歩が半径  $\sqrt{2}h/4$  の円内に見出される確率を求めてみると、(31) 式の  $n$  に2を代入することによってこの値は  $1/3$  であることがわかる。円に内接する一辺  $h$  の正方形内ではこの確率  $S$  は  $1/2$  を越えるものと推定され、したがって確率  $r$  は (23) 式から  $1/8$  以下と考えられる。

(28) 式において  $S$  は助変数となっており、 $D$  が与えられ、 $h$  を指定すると  $\tau$  の値は  $S$  の与え方で自由に変えることができる。たとえば  $D=1, h=1/10$  (任意単位)、 $S=1/2$  とすると、 $\tau=1/800$  (任意単位) となる。いま仮に  $s=r$  とすると (23) 式から  $s=r=1/5$

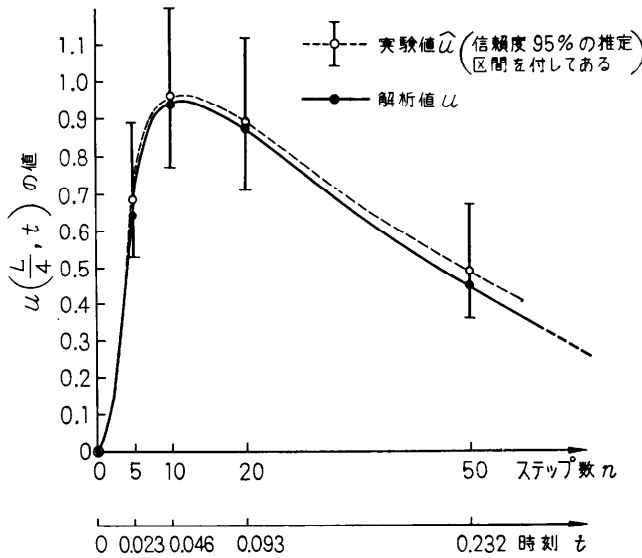
と定まり、上と同様にして  $S=1/5$  の場合の  $\tau$  の値を計算すると  $\tau=1/500$  (任意単位) となり、この場合は時間間隔を  $s=1/2$  の場合に比べて 1.6 倍にしていることになる。したがって  $D, h, \tau$  のすべてが指定されないかぎり  $s$  の値は自由に選ぶことができる。

シミュレーションにおいてはランダム・ウォーク・ポイントがとどまったりあるいは移動したりするのを乱数によって決定するのであるが、 $s=r$  に選ぶと等確率に出現する乱数 (一様乱数あるいは矩形乱数とも呼ぶ) を用いることができ、乱数の発生もまた乱数の検定も比較的容易である。なお、一次元の場合には  $s=r=1/3$ 、二次元の場合には  $s=r=1/5$ 、三次元の場合には  $s=r=1/7$  にとれば、シミュレーションにおいて一様乱数を用いることができる。

4.3 実験例

最も簡単な一次元の熱拡散の初期値問題について改良形モデルを用いたシミュレーションによる解と解析解とを比較検討した。

$u(x, t)$  を時刻  $t$  における点  $x$  の温度とすると関数  $u$  は次式を満足する。



第 8 図 初期値問題の解

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{32}$$

ただし  $D$  は熱拡散率である。仮に  $D=0.5$  とし、このときの境界条件を

$$\left. \begin{aligned} u(0, t) &= 0 \\ u(L, t) &= 0 \end{aligned} \right\} \tag{33}'$$

初期条件を

$$u(x, 0) = \delta\left(x - \frac{L}{2}\right) \delta(t) \tag{33}$$

とする。このときの  $u(L/4, t)$  の値を以下に述べる方法で求めた。

$L$  を規格化して 1 とし、これを仮に 12 等分する。したがって  $h=1/12$  (任意単位) となる。一次元の場合  $s=r=1/3$  であるから  $\tau=h^2/3D$  より  $\tau=1/216$  (任意単位) となる。したがって時刻  $t$  はステップ数  $n$  と  $\tau$  との積で表わされる。

上の条件を満足する  $u$  の値は解析的に次式で与えられる。

$$u\left(\frac{L}{4}, t\right) = \sum_{j=1}^{\infty} 2e^{-Dj^2\tau t} \sin\frac{j\pi}{2} \sin\frac{j\pi}{4} \tag{34}$$

一方シミュレーションによる  $u$  の推定値  $\hat{u}$  は次式で与えられる。

$$\hat{u}\left(\frac{1}{4}, n\tau\right) = U\left(\frac{1}{4} \mid \frac{1}{2}, n\tau\right) \times \frac{1}{h} \tag{35}$$

第 8 図に両者の値を示す。この場合  $\hat{u}$  は 1000 回のランダム・トリップから求めたものである。

4.4 考察

従来のモデルを用いた場合は  $L/4$  の点を固定して考えるとランダム・ウォーク・ポイントは偶数ステップでは絶対に到達しないが、改良形モデルではこのようなことは起こらない。

しかしこの改良形モデルを使用すると 1 トリップ当たりの平均ステップ数  $\bar{n}$  が従来のものより多くなり、そのため

(1) 必要とする乱数が多くなる。

(2) シミュレーションに要する時間が長くなる。

従来のモデルにおける平均ステップ数の近似値  $\hat{n}$  は次式で与えられることが知られている<sup>13)</sup>。

$$\hat{n} = k \left(\frac{R}{h}\right)^2 \quad (k: \text{定数}) \tag{36}$$

ここで  $R$  はランダム・ウォークを行なわせる閉領域を完全にとり囲む円の半径である。

これに対して改良形の場合は簡単な計算から上の近似値の 3/2 倍 (一次元), 5/4 倍 (二次元), 7/6 倍 (三次元) 程度であることが期待される。

仮に  $N$  個の乱数を使用して両方の形のモデルを使用した場合の解の近似度を検討する。一次元の場合を例にとると  $N$  個の乱数を使用してシミュレーションを行

なった場合、期待されるランダム・トリップの回数は従来のモデルでは  $N/\hat{n}=m$  回、改良形モデルでは  $N/2\hat{n}=2/3m$  回となる。

一般に中心極限定理によって区間推定を行なう場合、 $m$  回の実験では

$$P_r \left( \frac{\frac{m'}{m} + \frac{a^2}{2m} - \sqrt{\left(\frac{m'}{m} + \frac{a^2}{2m}\right)^2 - \left(\frac{m'}{m}\right)^2 \left(1 + \frac{a^2}{m}\right)}}{1 + \frac{a^2}{m}} \right) \leq P \leq \left( \frac{\frac{m'}{m} + \frac{a^2}{2m} + \sqrt{\left(\frac{m'}{m} + \frac{a^2}{2m}\right)^2 - \left(\frac{m'}{m}\right)^2 \left(1 + \frac{a^2}{m}\right)}}{1 + \frac{a^2}{m}} \right) \sim \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^a e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (37)$$

で与えられる<sup>14)</sup>。ただし  $P$  は求めるべき値 ( $U$  に相当)、 $m'$  は  $m$  回の試行中注目している現象が起った回数、 $a$  は信頼限界で  $a=2$  のとき約 95%、 $a=3$  のとき約 99% である。  $2/3m$  回の実験では推定区間が広がり、 $m$  回のときと同じ推定区間をとると信頼度が低下する。

## 5. むすび

規格化したランダム・ウォーク・シミュレーションによる拡散の方程式の数値模型について

(1) 従来のモデルでは拡散の方程式の係数とシミュレーションにおけるパラメータとの関係は仮定的なものであったが、これを Chapman-Smoluchovski の方程式を用いて検討し、両者の一致を確かめた。

(2) 従来のモデルの不備な点を指摘して、これを修正した改良形モデルを考案し、変形した Chapman-Smoluchovski の方程式を用いてこのモデルを検討した。さらにそのとき導入したとどまる確率について Kluyver の解を用いて検討した。

終りに終始懇切なる指導を賜った大阪市立大学工学部平井平八郎教授、種々の助言を賜った大阪大学工学部杉山博教授、大阪府立大学工学部宮武修教授に感謝の意を表す。

(なおこの研究は著者が大阪市立大学大学院在学中に行なったものである。)

## 参考文献

- 1) 石桁, 平井: 三次元ランダム・ウォーク装置とその応用, 電気学会雑誌, 86, 930, 昭和41年3月, pp. 490~498.

- 2) M.C. Wang and G.E. Uhlenbeck: On the Theory of the Brownian Motion II, Rev. Mod. Phys., 17, 2-3, Apr.-July 1945, pp. 323~342.
- 3) 寺本: マルコフ過程と力学過程, 槇書店, 昭和36年, pp. 118~121.
- 4) S. Chandrasekhar: Stochastic Problems in Physics and Astronomy, Rev. Mod. Phys., 15, 1, Jan. 1943, pp. 1~89.
- 5) J. Crank: Mathematics of Diffusion, Oxford, 1956, p. 5.
- 6) 福島: 統計的現象, 岩波書店, 昭和12年, p. 12.
- 7) 宮武, 中山: モンテカルロ法, 日刊工業新聞社, 昭和35年, p. 119.
- 8) H. Sugiyama and O. Miyatake: Design of Random Walker for Monte-Carlo method Part I, Jour. of the Inst. of Polytechnics, Osaka City Univ., Ser. D, 9, Dec. 1958, pp. 35~41.
- 9) W. Feller: An Introduction to Probability Theory and its Applications, John Wiley, 1950, pp. 279~306 pp.
- 10) 石桁: 三次元ランダム・ウォーク装置とその応用, 大阪市立大学大学院工学研究科学位論文, 昭和40年12月.
- 11) 文献3)のpp. 6~11.
- 12) 伏見: 確率論及統計論, 河出書房, 昭和16年, pp. 211~216.
- 13) A.D. Booth: Numerical Methods, London Butterworths Scientific publications, 1955, Chap, 8.
- 14) 文献7)のpp. 139~140.

## 〔付録 1〕

Brown 運動において粒子の平均自由行程が零でないかぎり、ある一定時間、粒子がある空間位置にとどまる確率はほとんど零に近い。ここで述べているとどまる確率とは、ある時刻に、ある空間位置にいた粒子が一定時間のうちにその点に再び見出される確率(再帰確率と考えられる)をさすのである。

## 〔付録 2〕

ランダム・ウォーク・ポイントがとどまる確率および移動する確率のほかに斜めに移動する確率を導入したモデルでは次式のような楕円形偏微分方程式が成り立つことは(19)式を Taylor 展開すれば明らかである。

$$\frac{\partial U}{\partial t} = D \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + D' \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} + D'' \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}$$

(昭和41年6月30日受付)