А. Антипин (A.Antipin)
a1_mail@inbox.ru

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

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

Abstract

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.

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.

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

$$\mathbf{k}=n_1 *\mathbf{k_1} + n_2 *\mathbf{k_2} + \ldots + n_N *\mathbf{k_N} ,$$

где $\mathbf{k_i}$ – направляющие, взаимно перпендикулярные единичные вектора, а n_i - пробегает все возможные целые значения: 0, ± 1, ± 2, ± 3,… Моделью решётки в 1-мерном случае служит ось $\mathbf{X}$ 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,…). Какова вероятность $\mathbf{P}_L(X,Y,Z,\ldots)$, что на шаге L точка окажется в узле $(X,Y,Z,\ldots)$ с учётом того, что:

- все значения $X,Y,Z,\ldots$ и L - произвольные целые числа $\geq$ 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 ½ для прямой, ¼ для плоскости, 1/6 в случае 3-х измерений и, в общем случае, $\mathbf{P} = \frac{1}{2N}$, где N = 1, 2, 3,…- размерность пространства в "общепринятом" смысле.)

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

$$\mathbf{P}_L(\mathbf{k}) = \mathbf{P}_L(k_1, k_2, \ldots, k_N) = \frac{1}{(2\pi)^N} \int_{-\pi}^{\pi} \ldots \int_{-\pi}^{\pi} [\frac{1}{N}(c_1 + c_2 + \ldots + c_N)]^L * exp(-i\varphi\, \mathbf{k})\, d^N\varphi ,$$

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

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:

$$\boldsymbol{P}_L(X) = \left(1/2^L \right) * \binom{L}{\frac{L+X}{2}}$$

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 $\boldsymbol{P}_L(X,Y,Z,\ldots)$ попадания в данный узел, вычисляется делением (нормировкой) числа траекторий $\mathbf{K}_L(X,Y,Z,\ldots)$, 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 $\boldsymbol{(2N)^L}$. 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 биноминальные 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 самыми «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:

$$\boldsymbol{K_L(X,Y)=} \begin{pmatrix} L \\ \dfrac{L+X+Y}{2} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} L \\ \dfrac{L+X-Y}{2} \end{pmatrix}$$

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

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

где $\boldsymbol{P_L}$ *(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:

$$\boldsymbol{P_L}\ (X,Y,Z) = \left(1\big/6^L \right) *$$

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

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>=3, это не так - движение невозвратно. Например, для нашего случая простой объёмной решётки, вероятность возвращения в начало координат имеет значение p= 0,3405… [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. Монтрол в сб. Прикладная комбинаторная математика, ред. Э.Беккенбаха, М., Мир, 1968, стр. 11.

2. Двайт Г.Б., Таблицы интегралов, М., Наука, 1973, стр.12.