酔歩 (random walk) と拡散 (diffusion)

格子定数が a の正方格子上をランダム運動する粒子が，あるステップ-$(n+1)$（時刻 $t+\tau$）に座標 (x,y) にいる為には，1 つ前のステップ-n（t）では，座標 $(x+a,y),(x-a,y),(x,y+a),(x,y-a)$ の何れかにいなければならない。これらの座標から (x,y) に移動する確率は各 1/4 である。粒子が時刻 t において (x,y) にいる確率 $P(x,y,t)$ とすると，次の関係式が成り立つ。

$$p(x,y,t+\tau)=\frac{1}{4}\{p(x+a,y,t)+p(x-a,y,t)+p(x,y+a,t)+p(x,y-a,t)\} \tag{1}$$

両辺から $p(x,y,t)$ を差し引くと

$$\begin{aligned} p(x,y,t+\tau)-p(x,y,t) &= \frac{1}{4}\{p(x+a,y,t)-2p(x,y,t)+p(x-a,y,t) \\ &\quad p(x,y+a,t)-2p(x,y,t)+p(x,y-a,t)\} \end{aligned} \tag{2}$$

然るに，

$$p(x+a,y,t)-2p(x,y,t)+p(x-a,y,t) \simeq \frac{\partial^2 p}{\partial x^2}a^2 \tag{3}$$

$$p(x,y+a,t)-2p(x,y,t)+p(x,y-a,t) \simeq \frac{\partial^2 p}{\partial y^2}a^2 \tag{4}$$

$$p(x,y,t+\tau)-p(x,y,t) \simeq \frac{\partial p}{\partial t}\tau \tag{5}$$

であるから，$D=a^2/(4\tau)$ として，階差方程式（1）は次の偏微分方程式に書き直すことが出来る。

$$\frac{\partial p}{\partial t}=D\left(\frac{\partial^2 p}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 p}{\partial y^2}\right) \tag{6}$$

上式は 2 次元の拡散方程式である[1]。

以上の事から，酔歩運動と拡散とは物理的に等価な現象であることが判る。デカルト座標 (x,y) を極座標 (r,ϕ) に変換すると

$$p(r,\phi,t)rdrd\phi=(4\pi Dt)^{-1}\mathrm{e}^{-r^2/(4Dt)}rdrd\phi \tag{7}$$

したがって，r と $r+dr$ の間にある確率 $p(r,t)$ は

$$p(r,t)dr=(2Dt)^{-1}\mathrm{e}^{-r^2/(4Dt)}rdr \tag{8}$$

$r=ja$ とし各区間で積分すると，

$$P_j(t)=\frac{1}{2Dt}\int_{ja}^{(j+1)a} r\ \exp\{-r^2/(4Dt)\}dr=\exp\left\{-\frac{j^2\tau}{t}\right\}-\exp\left\{-\frac{(j+1)^2\tau}{t}\right\}. \tag{9}$$

[1] *Fokker-Planck* 方程式として知られている。この方程式の解は半価幅が $t^{1/2}$ で増加するガウス分布で次のように表される。

$$p(x,y,t)=(4\pi Dt)^{-1}\mathrm{e}^{-(x^2+y^2)/(4Dt)}$$

酔歩シミュレーションのプログラムと実行結果を以下に示す．図 1 には $r = ja\,(j = 1〜50)$ の各区間での統計結果と (9) 式による理論値が示されている．

<< F-BASIC プログラム[2] >>

```
'
' Diffusion of N particles
'
data 1,0, 0,1, -1,0, 0,-1
color 0,15:cls:X0=320:Y0=200
gosub *RNTIME
N=5000:LY=0.3:MN=50
for K=1 to 4:read DX(K),DY(K):next
dim X(N),Y(N),P(MN)
for I=1 to N:X(I)=0:Y(I)=0:next
line(100,350)-(100+MN*5+5,100),,1,b
M=0
10 M=M+1:if M mod 50=0 then gosub *BUNPU
for I=1 to N
K=int(4*rnd(1)+1)
XX=X(I)+DX(K):YY=Y(I)+DY(K)
X(I)=XX:Y(I)=YY
next
goto 10
*RNTIME
T=time:T2=T mod 65534:TR=T2-32767
randomize TR
return
```

```
*BUNPU
for I=1 to N
R=sqr(X(I)^2+Y(I)^2):MR=int(R)
if MR>MN then MR=MN
P(MR)=P(MR)+1
next
for J=0 to MN
line(100+J*5,350)-(100+J*5,350-P(J)*LY),,5
next
locate 1,3:print
for J=0 to MN:J1=J+1
ER1=exp(-J^2/M):ER2=exp(-J1^2/M)
PJ=int(N*(ER1-ER2)+0.5)
circle(100+J*5,350-PJ*LY),2,3
next
locate 1,1:print "T=";M;"steps"
input "hit any key";a$
for J=0 to MN:J1=J+1
ER1=exp(-J^2/M):ER2=exp(-J1^2/M)
PJ=int(N*(ER1-ER2)+0.5)
circle(100+J*5,350-PJ*LY),2,15
line(100+J*5,350)-(100+J*5,350-P(J)*LY),,15
P(J)=0
next
return
```

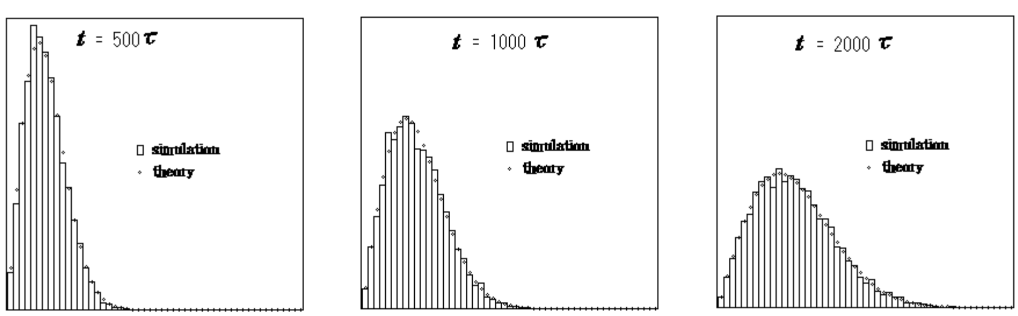

図 1: 酔歩のシミュレーション結果 (N=5000)

[2]富士通が開発した F-BASIC コンパイラーは発売中止になっているが類似の free の N88BASIC インタープリタ（開発者：潮田 康夫氏）は Web からダウンロードできる．http://www.vector.co.jp/soft/win95/prog/se055956.html