

1 Введение

В рамках проекта 19455 "Решёточные модели макромолекул где одной в основных задач было исследование долей мономеров случайного блуждания без самопересечений (далее SAW) фиксированной длины на квадратной решетке, возник вопрос сравнения значений долей для конфигураций в пределе бесконечной длины n_i и вероятность блуждания иметь атмосферу k $p^{(k)}$ (то есть, вероятность, что конец блуждания фиксированной длины N будет иметь k свободных от мономеров узлов решётки, или k возможных способов присоединить новый, $N + 1$ -й узел). Предполагалось, что доля узлов с i соседями распространяется и на концы блужданий - то есть, если блуждание имеет возможность присоединить новый узел, и распределение атмосфер имеет вид $P = (p^{(1)}, p^{(2)}, p^{(3)}) / (p^{(1)} + p^{(2)} + p^{(3)})$, и распределение долей узлов с 4,3,2 соседями $n = (n_4, n_3, n_2)$, то в пределе на бесконечную длину блуждания $P = n$.

Доли узлов с фикс. числом соедей для модели SAW подсчитывали симуляциями методами Монте-Карло, в то время как данные о распределении атмосфер были взяты из статьи Томаса Преллберга [1]. Результатом исследования оказалось близкое совпадение p_3 и n_2 , однако разница всех сопоставленных значений оказались больше погрешности, что означало, что обе величины оценивают разные аспекты поведения модели блуждания без самопересечений.

Данная работа посвящена схожему исследованию, но уже для родительской по отношению к SAW модели - простого случайного блуждания (далее Rand-Walk). Для этой модели узлы решетки могут быть посещены неограниченное количество раз. Подсчёт долей узлов проводился среди уникальных узлов случайного блуждания, дабы предупредить пересчёт. Полный алгоритм расписан в отчёте проекта 19455.

Основной же целью практики будет исследование величины, предположительно являющейся аналогом атмосфер Преллберга, представленная в качестве ответа задачи III.9 в книге "Теория случайных блужданий" Франка Спизера. Задача сформулирована следующим образом:

- Случайное блуждание на квадратной решётке начинается из некоторой точки $x_0 = \chi$, не лежащей в начале координат.
- Процесс случайного блуждания длится не фиксированное количество шагов, а до фиксированной *точки остановки* - до достижения блужданием начала координат $x_{end} = 0$
- До достижения точки остановки блуждание может посетить одну или несколько соседних с началом координат точек - $(0,1)$, $(1,0)$, $(0,-1)$, $(-1,0)$. Пусть число посещенных блужданием соседних точек $N \in \{1, 2, 3, 4\}$

- Задачей является вычислить вероятности блуждания посетить каждое возможное количество соседних точек для бесконечно удаленной от начала координат начальной точки блуждания χ :

$$p_n = \lim_{|\chi| \rightarrow \infty} P_\chi[N = n] = ?, \quad n = 1, 2, 3, 4$$

Так же в качестве подсказки было указано, что отношение $p_1 : p_2 : p_3 : p_4$ почти равно $4 : 3 : 2 : 1$.

Задачами научно-исследовательской практики являются проработка материала книги, теория которой позволит решить задачу III.9 и получить её теоретическое решение, поиск экспериментального ответа на задачу путём симуляцией модели, представленной в задаче методами Монте-Карло, а так же сравнение результатов с долями узлов модели, исследованной ранее в рамках проекта.

2 Литературный обзор

Данный подраздел посвящён рассмотрению случая двумерного возвратного случайного блуждания, движущемся по состояниям пространства R (пространство целочисленных векторов размерности d) до достижения одного из элементов $A \subset R$. Под T или T_A мы будем подразумевать момент остановки - минимальное число $1 \leq k \leq \infty$, такое что $x_k \in A$, то есть минимальное время достижения процессом x_i состояния из пространства A .

2.1 Основные вероятностные функции

Здесь будут более тщательно описаны используемые в главе функции вероятностей перехода.

Элементарной функцией, характеризующей случайное блуждание, является *переходная функция* $P(x, y)$:

$$0 \leq P(x, y) = P(0, y - x)$$

$$\sum_{x \in R} P(0, x) = 1$$

Первое свойство крайне полезно в будущих рассуждениях, так как будет наследоваться многими следующими функциями и упрощает рассмотрение пространство переходов до некоторой области вокруг начала координат. Например, в $G(x, y)$ - ожидаемое число попаданий в y при начальной точке x :

$$G(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(x, y) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(0, y - x) = \sum_{n=0}^{\infty} P_x[x_n = y] \quad (2.1)$$

$Q_n(x, y)$ определена на $(R - A) \times (R - A)$, $n \geq 0$ и обозначает вероятность попасть на n -м шаге в y (при $x_0 = x$), не попав за это время в A . Логично, что при остановке $T < n$ вероятность достижения на n -м шаге не существует, т.к. процесс остановлен.

$$Q_n(x, y) = P_x[x_n = y; T > n] \quad (2.2)$$

Функция $H_A^{(n)}(x, y)$, наоборот, определяет вероятность n -м шаге остановиться в $y \in A$ (то есть, y является первым состоянием из A , в которое попал процесс. В данном случае H_A определено на $R \times A$

$$H_A^{(n)}(x,y) = \begin{cases} P_x[x_T = y; T = n], & x \in R - A \\ 0, & x \in A, n \geq 1 \\ \delta(x,y), & x \in A, n = 0 \end{cases} \quad (2.3)$$

$H_A(x,y)$ является обобщением предыдущей функции по времени, определяя лишь вероятность остановки процесса, начавшегося в x , в $y \in A$ и определена там же как и $H_A^{(n)}(x,y)$.

$$H_A(x,y) = \begin{cases} P_x[x_T = y; T < \infty], & x \in R - A \\ \delta(x,y), & x \in A \end{cases} \quad (2.4)$$

Для случая $x \in R - A$ эту функцию можно определить так же как:

$$H_A(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} H_A^{(n)}(x,y) \quad (2.5)$$

Особым случаем является вероятность $\Pi_A(x,y)$, существование которой обусловлено тем фактом, что время остановки должно быть натуральным числом - строго говоря, процесс может начаться в $x \in A$, пройти по $x_1, x_2, \dots, x_{T-1} \in R - A$ и остановиться в $y \in A$.

$$\Pi_A(x,y) = P_x[x_T = y, T < \infty] \quad (2.6)$$

Последняя функция - $g_A(x,y)$, обобщает по времени Q_n :

$$g_A(x,y) = \begin{cases} \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(x,y), & x, y \in R - A \\ 0, & otherwise \end{cases} \quad (2.7)$$

2.2 Соотношения между функциями

Перейдём к некоторым предложениям из книги, которые позволят более полно понять природу некоторых функций в зависимости от начального состояния в них. Здесь будет описана лишь их вольная интерпретация, без доказательства.

Для произвольного случайного блуждания (Предложение 10.1(a)):

$$\sum_{t \in R} P(x,t) H_A(t,y) - H_A(x,y) = \begin{cases} \Pi_A(x,y) - \delta(x,y), & x \in A, y \in A \\ 0, & x \in R - A, y \in A \end{cases} \quad (2.8)$$

Пункт (a) предложения 10.1 проводит важную связь между $\Pi_A(x,y)$ и $H_A(x,y)$ при разных начальных состояниях: при $x \in R - A$ выражение равно нулю, как так оба слагаемых

выражают один и тот же процесс из начального состояния до множества остановки, как со смещением (первое слагаемое), так и без него (правое). Равенство для случая $x \in A$ подтверждает раннюю интерпретацию функции $\Pi_A(x, y)$: шаг из множества остановки ($P(x, t)$) и затем движение из t до остановки снова в A .

$$0 \leq g_A(x, y) \leq g_A(y, y) \forall x, y \in R$$

То есть ожидаемое число попаданий из начального состояния x в y в обход A всегда меньше или равно чем ожидаемое число возвращений в начальное состояние. Если блуждание является аperiodичным, то:

$$g_A(x, x) < \infty \forall x \in R$$

Для $x \in R - A, y \in A$:

$$H_A = \sum_{t \in R} g_A(x, t) P(t, y)$$

$$G(x, y) = \sum_{t \in A} H_A(x, t) G(t, y)$$

2.3 Начало потенциала

Так как в движении блуждания важнейшую роль играет множество остановки (которое может быть как конечное, так и бесконечное), то основное внимание главы уделено распределению конечной точки блуждания $H_A(x, y), x \in R, y \in A$, обсуждение которого начинается с расширения предложения 10.1(a) (оно же 11.1):

$$\sum_{t \in R} P_{n+1}(x, t) H_A(t, y) = H_A(x, y) + \sum_{t \in A} G_n(x, t) [\Pi_A(t, y) - \delta(t, y)], n \geq 0 \quad (2.9)$$

Необходимо заранее подчеркнуть, что это и последующие предложения считаются верными для аperiodичных, возвратных, двумерных СБ. Примером такого служит простое случайное блуждание на плоскости, которое исследовалось под названием Rand-Walk. Данное утверждение является первым шагом к исследованию распределения точки блуждания из бесконечно удаленной точки, однако перед этим выражение требует некоторых преобразований.

Крайне важным, хотя и очевидным утверждением является предложение 11.2:

$$\sum_{t \in A} \Pi_A(t, y) = \sum_{t \in A} \Pi_A(y, t) = 1, \forall y \in A \quad (2.10)$$

Другими словами, аperiodичные возвратные СБ рано или поздно при выходе из множества A попадут в него же. Теперь можно справедливо утверждать, что:

$$\sum_{t \in A} \Pi_A(t, y) - 1 = \sum_{t \in A} [\Pi_A(t, y) - \delta(t, y)] = 0$$

Следовательно, мы можем модифицировать 11.1 добавлением любой независимой от t константы, которая будет сокращаться при раскрытии суммы:

$$\begin{aligned} \sum_{t \in R} P_{n+1}(x, t) H_A(t, y) &= H_A(x, y) + \sum_{t \in A} [G_n(x, t) - G_n(0, 0)] [\Pi_A(t, y) - \delta(t, y)] = \\ &= H_A(x, y) - \sum_{t \in A} A_n(x, t) [\Pi_A(t, y) - \delta(t, y)] \quad (2.11) \end{aligned}$$

$$A_n(x, y) = G_n(0, 0) - G_n(x, y) = \sum_{k=0}^n [P_k(0, 0) - P_k(x, y)]$$

Заметим, что $A_n(x, y)$ так же наследует свойство пространственной однородности от $G(x, y)$, которое получило его от $P(x, y)$. Поэтому дальше мы частенько будем использовать слегка упрощенное определение этой функции - $a_n(x) = A_n(x, 0)$

Именно начиная с утверждения 2.11 (формально, предложения 11.3) возникает задача перехода обеих частей предложения к пределу $n \rightarrow \infty$. Опуская доказательства существования пределов, положим следующие ответы.

1. $\lim_{n \rightarrow \infty} A_n(x, y)$ существует и определен как $A(x, y) = a(x - y)$
2. $\sum_{t \in R} P_{n+1}(x, t) H_A(t, y)$ существует, не зависит от t и определен как $\mu_A(y)$

Пока что промежуточным после последних рассуждений выражением для распределения конечной точки СБ при бесконечном (или неопределенном) числе шагов является предложение 11.4:

$$H_A(x, y) = \mu_A(y) + \sum_{t \in A} A(x, t) [\Pi_A(t, y) - \delta(t, y)] \quad (2.12)$$

Так же будет полезным рассмотреть не только движение из бесконечности до множества A , но и движение вокруг него - то есть, перемещение из $x \in A$ в $y \in A$. Очевидно, для этого важно более чётко определить способы использования функции $\Pi_A(x, y)$.

При рассмотрении некоторого конечного множества точек $B \subset R$, функция $A(x, y)$ легко представима в виде матрицы $A(x, y)$, $x, y \in B$, которое называется *сужением оператора* $A(x, y)$

на B . Такая матрица всегда имеет обратную, если $|B| \geq 2$ (предложение 11.8). Тем самым, мы получаем новый оператор $K_B(x, y)$, определенный так же на $B \times B$:

$$\sum_{t \in B} A(x, t) K_B(t, y) = \delta(x, y), x, y \in B \quad (2.13)$$

Далее исследуемое останочное множество мы будем обозначать как B , так как A занято новой функцией. Определим так же ещё несколько вспомогательных функций и константу:

$$K_B(\cdot y) = \sum_{x \in B} K_B(x, y) K_B(x \cdot) = \sum_{y \in B} K_B(x, y) K_B(\cdot y) = \sum_{x \in B} \sum_{y \in B} K_B(x, y)$$

Все эти инструменты помогут в определении и доказательстве основной теоремы парграфа, в которой, помимо самого предложения 11.4, есть нужная нам модификация. В случае $x, y \in B$ для 2.12 получим следующее выражение:

$$\delta(x, y) = \mu_B(y) + \sum_{t \in B} A(x, t) [\Pi_B(t, y) - \delta(t, y)]$$

Будет разумно перейти к матричной форме: левая часть будет единичной матрицей, первое слагаемое правой части будет матрицей M_B размера $|B| \times |B|$, каждая строка которой - вектор значений $\mu_B(y)$, а второе - результат произведения матрицами сужений оператора $A(x, y)$ и $\Pi - E$ на $B \times B$. Получим:

$$E = M_B + A \times (\Pi_B - E)$$

Применим оператор K_B слева:

$$K_B = K_B \times M_B + \Pi_B - E$$

Переход к элементам даст нам знакомые функции:

$$K_B(x, y) = K_B(x \cdot) \mu_B(y) + (\Pi_B - \delta(x, y))$$

Операция суммирования по строкам приведёт нас к двум важным пунктам теоремы:

$$K_B(\cdot y) = K_B(\cdot) \mu_B(y) \rightarrow \mu_B(y) = \frac{K_B(\cdot y)}{K_B(\cdot)}, \quad K_B(\cdot) > 0$$

Второй пункт выводится из ряда противоречий: если $K_B(\cdot) = 0$, то $K_B(\cdot y) = 0$ и матрица вырожденная и не имеет обратной (то есть, $A(x, y)$ не существует). Если $K_B(\cdot) < 0$, то $K_B(\cdot y) < 0$, однако из определения K_B :

$$\sum_{t \in B} A(x, t) K_B(t, y) = \sum_{t \in B} K_B(x, t) A(t, y) = \delta(x, y) \rightarrow \sum_{t \in B} \sum_{x \in B} K_B(x, t) A(t, y) = 1 > 0$$

$A(x, y) \geq 0$ из предложения 11.7, поэтому снова противоречие. Подстановка первого доказанного пункта в ранние выкладки даст нам последний пункт теоремы:

$$\Pi_B(x, y) - \delta(x, y) = K_B(x, y) - \frac{K_B(x \cdot) K_B(\cdot y)}{K_B(\cdot \cdot)} \quad (2.14)$$

В итоге мы увидели, насколько мощным инструментом является функция $A(x, y)$ даже в сужении на B : её вычисление позволяет моментально рассчитать распределение конечного состояния из бесконечно удалённого, или распределение при возвращении во множество B . Ранние выкладки приводят к выводу, что $\mu_B(y)$ есть не что иное как вектор распределения вероятности остановиться в $y \in B$ из бесконечно удалённой точки. Это будет доказано позже, однако мы уже сейчас и далее можем переопределить эту переменную как $H_{B\infty}, y$. Теперь важнейшей задачей является расчёт самой функции $A(x, y)$, далее известное как ядро потенциала блуждания.

2.4 Основные вероятностные функции в СБ в контексте гармонического анализа

Для начала необходимо определить основные понятия из теории гармонического анализа, которые понадобятся нам для вычисления ядра потенциала и его свойств. Заранее определим два пространства: первое, это R как d -мерное пространство состояний блуждания

$x = (x^1, x^2, x^3, \dots, x^d)$, где x^i - целые числа. Второе - это евклидово пространство E такой же размерности: $\theta = (\theta^1, \theta^2, \theta^3, \dots, \theta^d)$, где θ^i - вещественные числа. К элементам обоих пространств применима операция модуля $|x|, |\theta|$, а между ними - скалярное произведение $x \cdot \theta$.

У блуждания действующем в пространстве X с переходной функцией $P(x, y)$ существует *характеристическая функция случайного блуждания*:

$$\varphi(\theta) = \sum_{x \in R} P(0, x) e^{ix \cdot \theta}, \theta \in E$$

Основное действие, которое мы будем к ней применять и использовать для определения ранее известных функций, будет интеграл по кубу C (куб из пространства E с центром в начале координат и стороной 2π):

$$\int f d\theta = \int_{\pi}^{\pi} \dots \int_{\pi}^{\pi} f(\theta) d\theta_1 \dots d\theta_d$$

Теперь приведём некоторые примеры и увидим, насколько гармонический анализ упрощает работу с вероятностными функциями.

$$(2\pi)^{-d} \int e^{i\theta \cdot (x-y)} d\theta = \delta(x, y)$$

Наконец, расширим соотношение характеристической и переходной функции для нескольких шагов блуждания:

$$\varphi^n(\theta) = \sum_{x \in R} P_n(0, x) e^{ix \cdot \theta} P_n(0, x) = (2\pi)^{-d} \int e^{ix \cdot \theta} \varphi^n(\theta) d\theta$$

Теперь, мы можем возвращаться к определению $a_n(x, y)$.

$$a_n(x) = G_n(0, 0) - G_n(x, 0) = \sum_{k=0}^n P_k(0, 0) - P_k(x, 0)$$

Используя раннее определение k -й переходной функции через хар-ую функцию, получим:

$$a_n(x) = (2\pi)^{-2} \int (1 - e^{ix \cdot \theta}) [1 + \varphi(\theta) + \dots + \varphi^n(\theta)] d\theta = (2\pi)^{-2} \int \frac{1 - e^{ix \cdot \theta}}{1 - \varphi(\theta)} (1 - \varphi^{n+1}(\theta)) d\theta$$

Опустим доказательство интегрируемости по Лебегу левой скобки итогового выражения и скажем лишь, что модуль правой скобки ограничен 2, а сама $\varphi^n(\theta)$ по определению по модулю меньше или равна 1 на всей области определения функции. Следовательно, в пределе $n \rightarrow \infty$ правая скобка сходится к единице и в итоге:

$$a(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} a_n(x) = (2\pi)^{-2} \int \frac{1 - e^{ix \cdot \theta}}{1 - \varphi(\theta)} d\theta$$

Итак, весь аппарат исследования поведения блуждания в пространстве с остановочным множеством готов к использованию. Однако полученная формула кажется несколько неудобной - придётся считать потенциал в каждой исследуемой точке, вблизи она или далеко от начала координат. Следующий подраздел поможет справиться с данной преградой.

2.5 Блуждание с бесконечно удалённой начальной точкой

Данный раздел посвящён асимптотическому поведению ядра потенциала блуждания $A(x, y)$, начальная точка бесконечно удалена от начала координат (случай $|x| \rightarrow \infty$). Первый момент - это утверждение 12.2:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} [A(x, y_1) - A(x, y_2)] = 0$$

Утверждение будет более применимо в контексте $a(x)$ - тогда мы говорим не о разнице между значениями ядер потенциалов с разными конечными точками, а о разнице между значениями ядер потенциалов с двумя бесконечно удалёнными точками, тем самым обобщая это определение на расстояние нач. точки от начала координат:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} [a(x + y) - a(x)] = 0$$

Далее вычислим саму асимптотическую функцию для $a(x)$. Для упрощения ведения записей мы продолжим говорить только о простом случайном двумерном блуждании:

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} [a(x) - \frac{2}{\pi} \ln |x|] = \frac{1}{\pi} \ln 8 + \frac{2\gamma}{\pi}$$

где $\gamma = 0.5572 \dots$ - постоянная Эйлера.

Последнее незаписанное свойство ядра $A(x, y) = a(x - y)$, которое понадобится нам на практике и будет полезно для расчётов значений потенциалов рекурсивным методом - это следующее равенство, доказываемое ровно из определения:

$$\sum_{y \in R} P(x, y) a(y) - a(x) = \delta(x, 0) \quad (2.15)$$

Оно будет отправной точкой для расчётов потенциала, начиная из начала координат, как будет видно в следующем разделе.

2.6 Расчёт потенциала на практике для Rand-Walk

Начнём с небольшого преобразования интегральной формулы ядра потенциала:

$$a(x) = (2\pi)^{-2} \int \frac{1 - e^{ix \cdot \theta}}{1 - \varphi(\theta)} d\theta = (2\pi)^{-2} \left[\int \frac{1 - \cos x \cdot \theta}{1 - \varphi(\theta)} d\theta - i \int \frac{\sin x \cdot \theta}{1 - \varphi(\theta)} d\theta \right]$$

$$\varphi(\theta) = \frac{1}{4} [e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2} + e^{-i\theta_1} + e^{-i\theta_2}] = \frac{1}{2} [\cos \theta_1 + \cos \theta_2]$$

Ввиду симметричности области интегрирования, правый интеграл обращается в ноль. Более того, в купе с четностью косинуса в левой слагаемом, получим:

$$a(z) = a(-z) = a(\bar{z}) = a(-\bar{z}) = a(iz) = a(-iz)$$

Здесь нужно подчеркнуть, что мы всё так же работаем с векторами с целочисленными коэффициентами. Просто для более короткой записи мы сопоставляем каждому вектору $x = (x_1, x_2)$ комплексное число $z = x_1 + ix_2$, которое и записываем в качестве аргумента $a(x)$. Полученное свойство обозначает симметрию значений потенциала по обоим осям плоскости, а так же относительно обеих диагоналей. Это позволяет рассчитывать лишь одну восьмую всей оси.

Пользуясь свойством симметрии в выражении 2.15 в случае $x = 0$, при том что $a(0) = 0$, получим, что $a(1) = a(-1) = a(i) = a(-i) = 1$. Нетронутыми остались значения на диагоналях, которые придётся честно считать через интеграл, однако полную выкладку мы опустим:

$$a(n + in) = \frac{4}{\pi} \sum_{k=1}^n \frac{1}{2k-1} \quad (2.16)$$

Расчёт остальных точек будет протекать через уравнение 2.15, где неизвестная переменная является одной из соседних по отношению к известной. Вычисление ряда будет начинаться от точки на оси к диагонали.

2.7 Решение задачи

Собрав вместе 2.12, 2.14 и методы расчёта потенциала для любой точки, перейдём непосредственно к исследуемой задаче соседей (III.9). Чтобы регистрировать не только попадания блуждания в начало координат, что будет означать "полную остановку" блуждания, определим все пять точек ($z = \{-1, 0, 1, i, -i\}$) как остановочное множество B . Учитывая, с какими сложными вероятностными функциями мы можем теперь работать, идейно задача упрощается до случайного процесса, состояния в котором - те самые соседние к началу координат точки. Тогда вероятностью перехода между той или иной точкой будет выступать $\Pi_B(x, y)$ - её результат не зависит от времени (числа шагов, проведённых между точками множества B n). Более того, построенное таким образом множество B ограничивает способы попасть из одной гран. точки в другую - $x = 0 \in B$ требует проходить между гран. точками только "вокруг" B .

Первым пунктом решения задачи рассчитаем матрицу сужения оператора $A(x, y) = a(x - y)$ на множество B . Ввиду сильного свойства симметрии функции $a(x)$ и минимального разброса между точками B , достаточно рассчитать следующие потенциалы:

- $a(1) = 1$ - для всех пар $A(x, 0)$ и $A(0, y)$, $x, y \neq 0$, так как краевые точки по условию задачи - соседние к началу координат
- $a(1 + i) = \frac{4}{\pi}$ (2.16) - для пар смежных крайних точек (например, $\pm i$ и ± 1)

- $a(2) = 4 - \frac{8}{\pi}$ - между парами противоположащих точек $(A(1, -1), A(i, -i))$

Последний потенциал легко считается из уравнения (2.15) в случае $x = 1$. Полученная матрица сужения оператора имеет вид:

$$A_B(z_i, z_j) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 4 - \frac{8}{\pi} & \frac{4}{\pi} & \frac{4}{\pi} \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 4 - \frac{8}{\pi} & 1 & 0 & \frac{4}{\pi} & \frac{4}{\pi} \\ \frac{4}{\pi} & 1 & \frac{4}{\pi} & 0 & 4 - \frac{8}{\pi} \\ \frac{4}{\pi} & 1 & \frac{4}{\pi} & 4 - \frac{8}{\pi} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

$$z = \{-1, 0, 1, i, -i\}$$

Далее рассчитаем матрицу K_B 2.13, которая является обратной к A_B :

$$K_B = \begin{pmatrix} -0.573 & 0.25 & 0.115 & 0.229 & 0.229 \\ 0.25 & -1 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \\ 0.115 & 0.25 & -0.573 & 0.229 & 0.229 \\ 0.229 & 0.25 & 0.229 & -0.573 & 0.115 \\ 0.229 & 0.25 & 0.229 & 0.115 & -0.573 \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

$$K_B(\cdot y) = \{0.25, 0, 0.25, 0.25, 0.25\}, \quad K_B(\cdot \cdot) = 1 \rightarrow H(\infty, y) = \{0.25, 0, 0.25, 0.25, 0.25\}$$

Сейчас мы получили распределение начальной остановочной точки блуждания - первая точка из множества B , в которую попадёт блуждание - из бесконечно удалённой точки. Очевидно, второе значение вектора вероятностей, соответствующее началу координат ($z = 0$) равно нулю, в него невозможно попасть никак иначе, чем через соседние состояния. Вероятности попасть в них, в свою очередь, распределены равномерно - это объясняется тем, что при протекании блуждания из бесконечности, оно с большой вероятностью несколько раз обойдёт множество B . Тем самым, блуждание "забывает" свои предыдущие состояния и следовательно, направление.

Последним вычислительным пунктом задачи будет подсчёт матрицы Π_B по формуле (2.14):

$$\Pi_B(x, y) = K_B(x, y) - \frac{K_B(x \cdot) K_B(\cdot y)}{K_B(\cdot \cdot)} + \delta(x, y)$$

В матричном виде это примет вид:

$$\Pi_B = (K_B)_{|B| \times |B|} - K_B(x \cdot)_{|B| \times 1} \times K_B(\cdot y)_{1 \times |B|} / K_B(\cdot \cdot) + E_{|B| \times |B|}$$

$$\Pi_B = \begin{pmatrix} 0.365 & 0.25 & 0.053 & 0.166 & 0.166 \\ 0.25 & 0 & 0.25 & 0.25 & 0.25 \\ 0.053 & 0.25 & 0.365 & 0.166 & 0.166 \\ 0.166 & 0.25 & 0.166 & 0.365 & 0.053 \\ 0.166 & 0.25 & 0.166 & 0.053 & 0.365 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Получение данной матрицы имеет огромное значение, т.к. любой выход из множества B и возвращение обратно будет оцениваться именно через эту матрицу. Мы точно знаем, что для двумерных возвратных апериодичных блужданий возвращение в B при выходе из него гарантирован, поэтому все движения вне множества "сжимаются" до единовременного перехода между ними. В итоге, как было сказано ранее, задача о случайном блуждании и соседних началу координат состояниях упрощена до задачи случайного процесса с матрицей перехода P_B и начальным распределением $H(\infty, y)$: теперь количество посещенных соседних началу координат точек интерпретируется как количество посещённых уникальных состояний до первого достижения состояния 2 ($z=0$). Последовательность точек блуждания $\{X_i\} \subset R$ так же теперь упрощена до последовательности "остановок" $\{Z_{i*}\} \subset B$. Обе последовательности заканчиваются точкой $x_T = z_{T*} = 0$.

Перейдём непосредственно к расчёту вероятностей блуждания из бесконечно удалённой начальной точки посетить фиксированное число соседей. В первую очередь рассчитаем вероятность, что блуждание посетит лишь одну соседнюю точку $\lim_{|x| \rightarrow \infty} P_x[N = 1] = p_1$. Из определения простого случайного блуждания количество попаданий в одну и ту же соседнюю точку не ограничивается. Поэтому блуждания класса P_1 имеют вид $\{X_i\}_{p_1} = \{c, c, \dots, c, 0\}, c = \text{const}$. Формула вероятности таких блужданий имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} P_1 &= \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} H(\infty, t) (P_B(t, 0) + P_B(t, t) (P_B(t, 0) + P_B(t, t) (\dots))) = \\ &= \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} H(\infty, t) P_B(t, 0) (1 + P_B(t, t) + P_B^2(t, t) + \dots + P_B^2(t, t) + \dots) = \\ &= \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} 0.25 \times 0.25 \sum_{k=0}^{\infty} P_B^k(t, t) \end{aligned}$$

$$P_B(t, t) = 0.365 \quad \forall t \in B \rightarrow P_1 = 0.25 \sum_{k=0}^{\infty} 0.365^k = \frac{0.25}{1 - 0.365} = 0.3936$$

Следующей ступенью решения задачи будет расчёт P_2 . Здесь задача усложняется тремя разными случаями - в зависимости от того, как блуждание перемещается:

1. между первой точкой остановки z_0 и правой смежной точкой (идущая по часовой стрелке)
2. между z_0 и левой смежной точкой
3. между z_0 и противоположной ему точкой

Вероятности перейти к левой смежной точке и правой смежной точке равны 0.166, к противоположной - 0.053. Назовём эти вероятности перехода на каждой шаге p_t, p_o ("probability of the turn", "probability of the opposite"). Вероятность вернуться в то же граничное состояние равно 0.365 для любой точки. Эту вероятность определим как p_{t0} . Вероятность перейти в конечное состояние $z_T = 0$ тоже независима и будет определена как p_e (Probability of the End). Тогда вероятность "блуждание пройдёт хотя бы по одной из двух точек" P_2^* имеет следующий вид:

$$P_2^* = 2 * \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} H(\infty, t) (p_e + (p_t + p_{t0})(p_e + (p_t + p_{t0})(\dots))) + \\ + \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} H(\infty, t) (p_e + (p_o + p_{t0})(p_e + (p_o + p_{t0})(\dots)))$$

Первое слагаемое удвоенно, так как здесь подсчитываются вероятности передвижения между начальной и смежной левой и между начальной и смежной правой. Вторая сумма - это вероятность передвижения между начальной и противоположной точкой.

Во всех случаях идёт суммирование по всем начальным точкам, что может вызвать сомнение - кажется, что мы подсчитываем одну блуждание между одной пары точек два раза. Однако если представить блуждание как последовательность $\{Z_i\} \subset B$, то единственное состояние, которое не регулируется скобкой - начальное. Поэтому подсчёт проходит для каждого возможного начального состояния.

Ранее было уточнено, что результатом расчёта является "вероятность" что блуждание посетит хотя бы одну точку из двух - ещё не гарантируется, что блуждание посетит обе точки за всё время. Более того, очевидно, что мы несколько раз прибавляем вероятность что блуждание посетит одну точку (по одному на каждый подсчёт блуждания с фиксированным нач. состоянием, то есть, три). Тогда чтобы "запретить блужданию" достигать начала координат через лишь одну точку, необходимо три раза вычесть P_1 :

$$P_2 = P_2^* - 3P_1 = 1.4957 - 3 * 0.3937 = 0.3146$$

Последним этапом будет расчёт P_3 (так как очевидно, что $P_4 = 1 - P_1 - P_2 - P_3$). Данный случай значительно сложнее предыдущих: если зафиксировать тройку соседей z_{i1}, z_{i2}, z_{i3} , между которых блуждание перемещается до достижения начала координат (назовём их "разрешёнными соседями"), то возникает серьёзная проблема расчёта вероятности на каждом шаге - если текущая точка блуждания лежит в центре разрешенной тройки (то есть, обе смежные текущей точки являются так же разрешёнными), то вероятность остаться в этой тройке равна $0.365 + 2 * 0.166 = 0.697$. Если же текущая точка - крайняя по отношению к разрешённой тройке, то вероятность ниже - $0.365 + 0.166 + 0.053 = 0.584$, поскольку одна из разрешённых точек находится на противоположной стороне множества B .

Получается, нужная нам вероятность остаться в "разрешенном подмножестве" не постоянная, а зависит от предыдущего состояния процесса $\{Z_i\}$. Значит, решить эту подзадачу по способу расчёта предыдущих вероятностей уже не получится. Подойдём к ней со стороны её матрицы перехода. Очевидно, что любой последовательности $\{Z_i\} = \{z_0, z_1, \dots, z_{T^*} = 0\}$ можно поставить в соответствие её вероятность:

$$P = H(\infty, z_0)P_B(z_0, z_1) \cdots P_B(z_{T^*-1}, 0)$$

Выходит, что вероятности блужданий, ни разу не посетившие одну фиксированную точку \hat{z} (назовём её "запрещённой"), не имеют в своей записи $P_B(\cdot, \hat{z})$, $P_B(\hat{z}, \cdot)$ и $H_B(\infty, \hat{z})$. Эта идея позволяет нам использовать для расчёта модифицированные матрицы переходной функции $P_B[\hat{z}](x, y)$, такие, что $P_B(\cdot, \hat{z}) = 0$ и $P_B(\hat{z}, \cdot) = 0$ - то есть, строки и столбцы запрещённого состояния просто занулены. То же самое мы делаем и с начальным распределением - определим $H_B[\hat{z}]$, такое что $H_B(\infty, \hat{z}) = 0$. Так же, по условию, что блуждание останавливается в точке начала координат, мы можем объявить состояние $z = 0$ поглощающим, то есть - занулить вероятности выхода из состояния 0 в любые другие, а вероятность $P_B(0, 0)$ объявить равной 1.

Тогда вероятность P_3 рассчитывается следующим образом в матричном виде:

$$P_3 = \sum_{t \in \{1, -1, i, -i\}} \lim_{k \rightarrow \infty} H_B[t]P_B^k[t] - 3P_1 - 2P_2 \quad (2.20)$$

Поскольку первое слагаемое подсчитывает блуждания которым "запрещено" посещать одну и из точек, мы никак не ограничиваем посещения лишь одной или двух из трёх разрешённых точек. P_1 вычитается трижды (за каждый раз, когда фиксированная точка становится разрешенной), P_2 - дважды (за каждый раз, когда фиксированная пара остается разрешенной).

Заметим так же, результатом выражения под знаком суммы будет сумма вероятностей всех блужданий, прошедших по любым точкам кроме t (так как вероятность иного блуждания

содержит хотя бы один нулевой множитель). В качестве наглядного примера рассчитаем одно из слагаемых - $\lim_{k \rightarrow \infty} H_B[i] P_B^k[i]$. По определению:

$$H_B[i] = \{0.25, 0, 0.25, 0, 0.25\}$$

$$P_B[i] = \begin{pmatrix} 0.365 & 0.25 & 0.053 & 0 & 0.166 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0.053 & 0.25 & 0.365 & 0 & 0.166 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.166 & 0.25 & 0.166 & 0 & 0.365 \end{pmatrix}$$

Найдём собственные значения и вектора матрицы $P_B[i]$:

$$P_B[i] = S \times D \times S^{-1},$$

$$D = \text{Diag}(0.6277, 0.312, 0.1546, 1, 0)$$

$$S = \begin{pmatrix} -0.527 & -0.707 & 0.471 & 0.416 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.654 \\ -0.527 & -0.707 & 0.471 & 0.416 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1.0 \\ -0.666 & 0 & -0.745 & 0.475 & 0 \end{pmatrix}$$

Такое разложение позволяет нам получить следующий предел:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} P_B[i]^k = \lim_{k \rightarrow \infty} (S \times D \times S^{-1})^k = S \times \lim_{k \rightarrow \infty} D^k \times S^{-1}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} D^k = \lim_{k \rightarrow \infty} \text{Diag}(0.6277^k, 0.312^k, 0.1546^k, 1^k, 0^k) = \text{Diag}(0, 0, 0, 1, 0)$$

В конечном счёте:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} H_B[i] P_B^k[i] = H_B[i] (S \times \text{Diag}(0, 0, 0, 1, 0) \times S^{-1}) =$$

$$= \{0.25, 0, 0.25, 0, 0.25\} \times \begin{pmatrix} 0 & 0.6366 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.6366 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.7268 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0.5$$

Из геометрической симметрии множества B и симметрии её нормальной матрицы перехода следует, что при запрете любой точки можно переставить состояния в матрице так, чтобы получить такую же матрицу $P_B[\hat{z}]$, как раньше. Поэтому:

$$P_3 = \sum_{t \in 1, -1, i, -i} 0.5 - 3P_1 - 2P_2 = 0.19 \quad (2.21)$$

И наконец, завершающая подзадача:

$$P_4 = 1 - P_1 - P_2 - P_3 = 0.1018 \quad (2.22)$$

2.8 Сравнение результатов с прямой задачей симуляцией

Результаты расчётов совпадают с подсказкой из задачи - действительно, пусть они не идеально точно, но $P_1 : P_2 : P_3 : P_4 \approx 4 : 3 : 2 : 1$.

Так же результаты были проверены симуляцией Монте-Карло - за основу бралась упрощённая модель случайного процесса с матрицей перехода P_B и начальным распределением $H_B(\infty, y)$. Основная часть кода, отвечающая за одиночную симуляцию модели (то есть, выводящая количество посещённых уникальных соседних началу координат точек) представлена на рисунке 1.

Процесс симулировался до достижения состояния $z = 0$ или до длины 100 (так как вероятность, что за такое время процесс ни разу не пройдёт это состояние пренебрежимо мала $\approx 3 * 10^{-13}$).

P_1	P_2	P_3	P_4	steps
0.393539	0.314722	0.190020	0.101719	226020000
0.393567	0.314689	0.190020	0.101725	449140000
0.393566	0.314680	0.190025	0.101729	638220000

Таблица 1: Доли блужданий, прошедших 1-4 уникальных состояний до достижения начала координат - и количество симулированных блужданий

Из таблицы 1 видно, что результаты совпадают с рассчитанными вероятностями.

Была так же попытка сделать модель случайного блуждания, идущего из точки на расстоянии R от начала координат, однако доля блужданий, которые не смогли добраться до начала координат за $R * 10^6$ была огромна. Поэтому "полный" вариант симуляций был упрощён.

2.9 Сравнение результатов с симуляцией Rand-Walk

Ранее в рамках проекта 19455 "Решеточные модели макромолекул" была проведена генерация модели случайного блуждания с самопересечениями (далее Random-Walk) для фиксированных

R	P_{error}	steps
10	0.413071	70000
20	0.477033	30000
50	0.533500	10000

Таблица 2: Доли блужданий с начальной точкой на расстоянии R, не достигших начала координат за $R * 10^6$ шагов - и количество симулированных блужданий

длин $10^2 - 10^4$. Рассматривалась доля узлов с фиксированным числом соседей - от 1 до 4 - среди уникальных узлов в итоговой конформации, для чистоты результатов и возможности сравнения с результатами случайного блуждания без самопересечений. Доли уникальных узлов так же бралась во внимание при симуляциях. Результаты симуляций, а так же количество итераций для каждой длины, описаны в таблице 3 и изображены на графике 2

На таблице видно явное несовпадение значений n_i из исследований Rand-Walk фиксированной длины и P_i из задачи Спитцера. Оно может быть объяснено следующим образом:

Можно сказать, что обе задачи являются обращениями друг друга - начало координат в Rand-Walk фикс. длины является начальной точкой блуждания, в то время как в задаче Спитцера - конечной. Это имеет принципиальную разницу, так как в первом случае начало координат может быть посещено бесконечное количество раз, что позволяет быстро перемещаться между его соседними блужданиями, а в другом - лишь однажды.

На основании полученных результатов можно сделать вывод, что при условии бесконечного количества шагов результаты обеих задач показывают поведение разных аспектов простого случайного блуждания.

3 Заключение

Основным итогом работы является литературный обзор главы III книги "Теория случайных блужданий посвященная поведению блужданий с остановочным множеством, модель которых применяемая в ряде физических и математических задач.

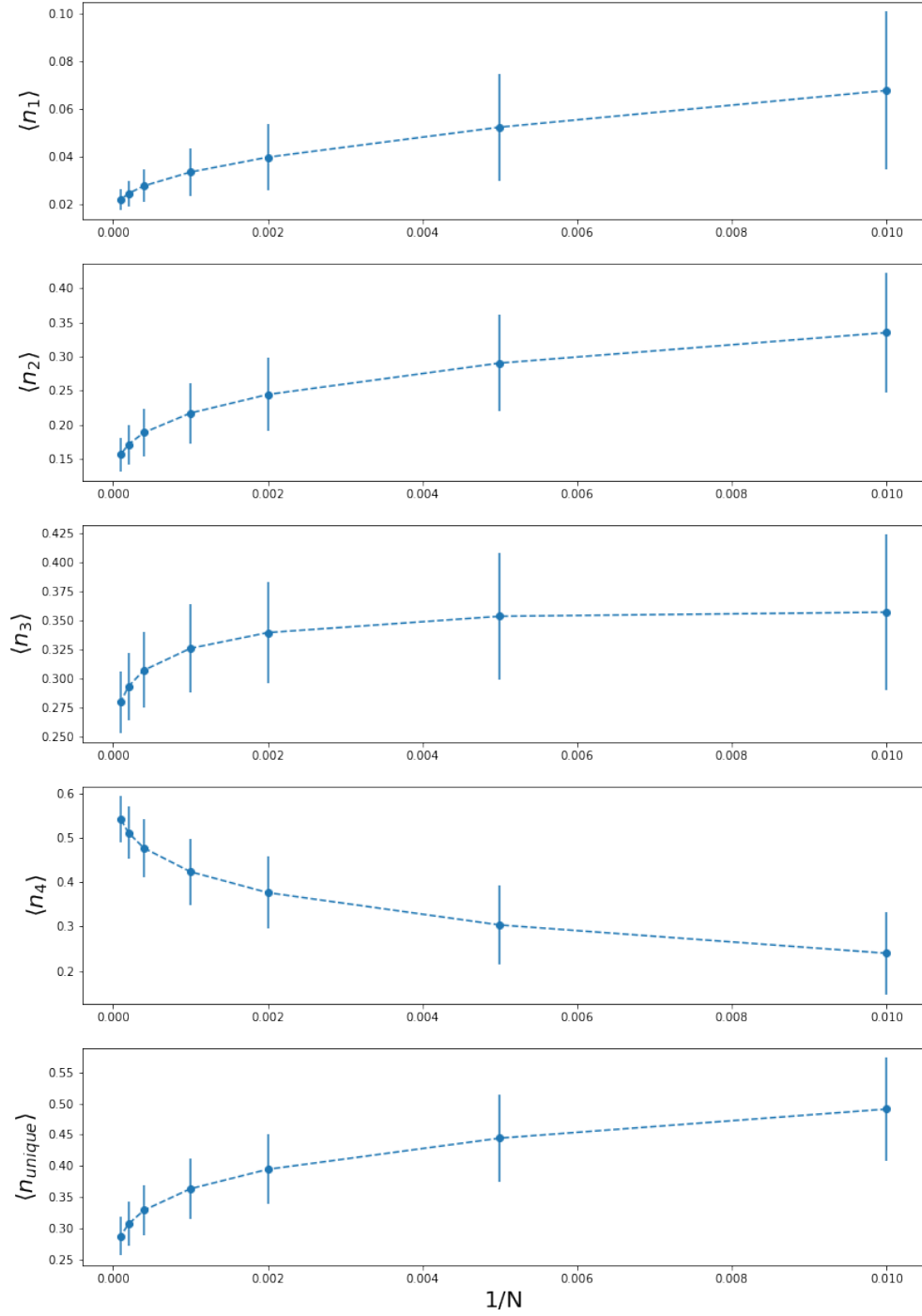
Так же в заключения можно добавить отрицательный результат сопоставления исследуемых величин, описывающих разное геометрическое поведение моделей.

4 Приложение

```
1 import numpy as np
2 from numba import njit, jit, prange
3
4 @jit(parallel=True)
5 def create_walk():
6     Pb = np.array([
7         [0.36477068, 0.05275528, 0.16623702, 0.16623702, 0.25],
8         [0.05275528, 0.36477068, 0.16623702, 0.16623702, 0.25],
9         [0.16623702, 0.16623702, 0.36477068, 0.05275528, 0.25],
10        [0.16623702, 0.16623702, 0.05275528, 0.36477068, 0.25],
11        [0, 0, 0, 0, 1.]], dtype=np.float_)
12    Xs = np.zeros(100, dtype=np.uint8)
13    Xs[0] = np.random.choice(4)
14    X_end = 0
15    for i in range(1, 100):
16        Xs[i] = np.random.choice(5, None, True, Pb[Xs[i-1]])
17        if Xs[i] == 4:
18            return Xs[:i]
19    return Xs
20
21 @njit
22 def linear_unique(X):
23     count = np.zeros(4, dtype=np.uint8)
24     for i in range(X.shape[0]):
25         count[X[i]] += 1
26     return (count > 0).sum()
27
28
29 @jit
30 def experiment():
31     Xs = create_walk()
32     return linear_unique(Xs)
```

Рис. 1: Исполнительная часть симулирующего кода, подсчитывающая кол-во посещённых точек до достижения начала координат

Рис. 2: Зависимость долей узлов с фиксированным число соседей в случайном блуждании от обратного кол-ва шагов в конформации $1/N$



N	<i>steps</i>	<i>unique</i>	n_1	n_2	n_3	n_4
100	7450000	0.49(8)	0.07(3)	0.33(9)	0.36(7)	0.24(9)
200	5684000	0.44(7)	0.05(2)	0.29(7)	0.35(5)	0.30(9)
500	2045000	0.39(6)	0.04(1)	0.24(5)	0.34(4)	0.38(8)
1000	654000	0.36(5)	0.03(1)	0.22(4)	0.33(4)	0.42(7)
2500	132000	0.33(4)	0.027(7)	0.19(3)	0.31(3)	0.48(6)
5000	37000	0.31(4)	0.024(5)	0.17(3)	0.29(3)	0.51(6)
10000	10000	0.29(3)	0.021(4)	0.16(2)	0.28(3)	0.54(5)

Таблица 3: Средние доли узлов с 1-4-мя соседями в конформациях модели Rand-Walk длин $10^2 - 10^4$

Список литературы

- [1] Ф Спицер. *Принципы случайного блуждания*. М.: Мир, 1969.