# CTRWのメモ*

石渡 龍輔

平成 25 年 2 月 28 日

## 注意

このまとめは、[1, 2, 3] を元にしたレビューのレビューです。

## 1 格子上のランダムウォーク

格子状の 1 次元ランダムウォークは、時刻 $t$, 位置 $j$ における粒子の存在確率を $W_j(t)$ として、

$$W_j(t+\Delta t) = \frac{1}{2}W_{j-1}(t) + \frac{1}{2}W_{j+1}(t), \tag{1}$$

と書ける。次に格子間隔 $\Delta x$ と時間間隔 $\Delta t$ の 0 極限を取ることで、格子上のランダムウォークを連続化する。

連続極限を取る都合から、$W_j(t) \to W(j\Delta x, t)$ と表記を変更する。式 (1) の Taylor 展開を行い $\Delta t \to 0,\ \Delta x \to 0$ に伴って $\Delta t,\ \Delta x$ の最低次数だけを残すことで、

$$\frac{\partial W(x,t)}{\partial t} = K_1 \frac{\partial^2 W(x,t)}{\partial x^2}, \tag{2}$$

$$K_1 = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ \Delta t \to 0}} \frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}, \tag{3}$$

Fokker-Planck equation を得る。式 (2) を解くために、ラプラス変換とフーリエ変換を式 (2) に施せば ($t \leftrightarrow u, x \leftrightarrow k$ )

$$W(k,u) = \frac{W_0(k)}{u + K_1 k^2}, \tag{4}$$

を得る、$W_0(k)$ は初期時刻における確率分布のフーリエ変換。式 (4) は、簡単に逆ラプラス変換できて、

$$W(k,t) = W_0(k) e^{-K_1 k^2 t}, \tag{5}$$

*2013/02/28 M.Iwasa さんのコメントにて時間に依存する場合の分布を書き直す

となる。これをフーリエ変換することで求めている確率分布が得られる。式 (5) の逆フーリエ変換は、ガウス積分を含んでいるため、途中計算を行う。$e^{-K_1k^2t}$ の逆変換中の指数関数を平方完成し変数変換を行うことで、

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\, e^{+ikx}e^{-K_1'k^2} = e^{-\frac{x^2}{4K_1'}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\, e^{-K_1'\left(k+\frac{ix}{2K_1'}\right)^2} \tag{6}$$

$$= e^{-\frac{x^2}{4K_1'}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty+\frac{ix}{2K_1'}}^{+\infty+\frac{ix}{2K_1'}}\mathrm{d}z\, e^{-K_1'z^2}, \qquad (k = z - \frac{ix}{2K_1'}), \tag{7}$$

を得る。ここで図 (1) のような積分路を考える。積分経路上に極は含まれていないため、$(\int_{C_1}+\int_{C_2}+\int_{C_3}+\int_{C_4})\mathrm{d}z\, e^{-K_1'z^2} = 0$ である。このとき、$C_2, C_4$ の積分は $R\to\infty$ と $R$ の極限を

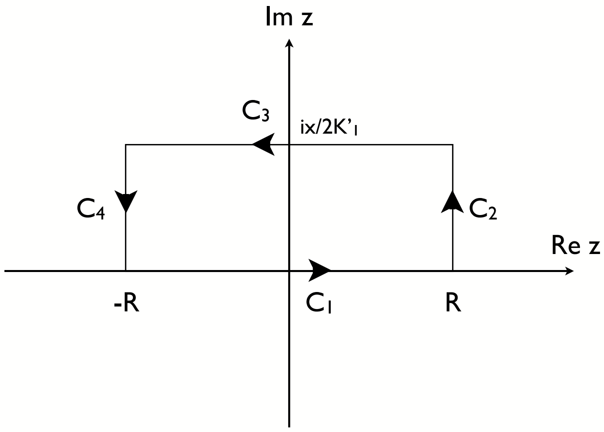


図 1: 積分経路

とるため、$e^{-K_1'z^2}$ の寄与から 0 に収束し、考えるべきは経路 $C_1, C_3$ だけとなる。$C_3$ は、求めたかった式 (7) のマイナス倍であるから、計算すべきは通常のガウス積分となり、計算の結果

$$e^{-\frac{x^2}{4K_1'}}\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}s\; e^{-K_1'k^2} = e^{-\frac{x^2}{4K_1'}}\sqrt{\frac{\pi}{K_1'}} \tag{8}$$

を得るので、これと $W_0(k)$ の畳み込み積分が $W(x,t)$ になる:

$$W(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{K_1t\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\, W_0(x-y)e^{-\frac{y^2}{4K_1t}}. \tag{9}$$

具体的な $W(x,t)$ は、$W_0(x)=\delta(x)$ とすれば、

$$W(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{K_1t\pi}}e^{-\frac{x^2}{4K_1t}}, \tag{10}$$

というよく知られたガウス分布になる。

## 2　連続時間ランダムウォーク (CTRW)

格子上でのランダムウォークは、離散時間における離散距離のジャンプを元にしている。格子上のランダムウォークに対して、連続時間ランダムウォークは連続の時間、空間を対象にしており遷移確率を「$t$ 時間待って距離 $x$ ジャンプする」確率 $\phi(x,t)$ に拡張してある。
まず始めに、時刻 $t$, 位置 $x$ における到着確率 $\eta(x,t)$ を考える。到着確率とは時刻 $t$, 位置 $x$ に粒子が位置 $x$ 以外の点から到着する確率であり、存在確率 $W(x,t)$ とは異なるものである。$\eta(x,t)$ は、

$$\eta(x,t) = \delta(x)\delta(t) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t' \; \eta(x',t')\phi(x-x',t-t'), \tag{11}$$

で与えられる、$\delta(x)\delta(t)$ は初期条件を表している。積分の中身は、$(x',t')$ に到着した粒子が、$t-t'$ 待って $x-x'$ だけジャンプして $(x,t)$ に到着する確率を表している。存在確率は、$(x,t)$ に粒子が到着する確率だけでなく $0 \le t' < t$ に到着した粒子が $x$ に留まることも考慮して、

$$W(x,t) = \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \; \eta(x,t')\Phi(t-t'), \tag{12}$$

と表す。$\Phi(t-t')$ は粒子が $t-t'$ の間ジャンプしない確率を表しており、

$$\Phi(t) = 1 - \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \; w(t'), \tag{13}$$

$$w(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \; \phi(x-x',t-t'), \tag{14}$$

$$\lambda(x) = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t' \; \phi(x-x',t-t'), \tag{15}$$

として表現される、$w(t)$ は $t$ 秒後にジャンプする確率を表しており、$1-\int_0^t \mathrm{d}t' \; w(t')$ とすることで $t$ 秒待ってもジャンプしない確率を表すことになる。 また $\lambda(x)$ は、ジャンプする距離の分布を表している。
式 (12) に式 (11),(13) を代入して整理すれば、

$$W(x,t) = \delta(x)\Phi(t) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t' \; \phi(x',t')W(x-x',t-t'), \tag{16}$$

を得る。この $W(x,t)$ も格子上のランダムウォークと同様に、ラプラス変換とフーリエ変換を用いて運動量空間に写して整理すれば

$$W(k,u) = \frac{W_0(k)}{1-\phi(k,u)} \frac{1-w(u)}{u}, \tag{17}$$

となる。

## 2.1 ガウス分布

格子上のランダムウォークと同じガウス分布が、CTRW から導出されることを示す。$\phi(x,t) = \lambda(x)w(t)$ としてそれぞれの時間と空間の遷移確率が独立であることを仮定する。次に待ち時間がポアソン分布で与えられ、ジャンプの距離分布が Gauss 分布で与えられるとする:

$$w(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}, \tag{18}$$

$$\lambda(x) = \frac{1}{2\sigma\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}. \tag{19}$$

このとき、$\phi(x,t)$ にラプラス及びフーリエ変換を行い、長波長での展開 $\tau << 1, k << 1$ を行えば、式 (17) は、

$$W(k,u) \sim \frac{W_0(k)}{u + K_1 k^2}, \tag{20}$$

$$K_1 = \frac{\sigma^2}{\tau}, \tag{21}$$

となる。結果は通常のランダムウォークと同様のガウス分布の運動量空間での表現となっており、CTRW が通常のランダムウォークを含んでいることが確認できた。(次数の残し方などは、長時間極限を取る限りに於いて正しい。)

## 2.2 レヴィ分布

ガウス分布の場合と同様に $\phi(x,t) = \lambda(x)w(t)$ を仮定する。ガウス分布との違いは、空間分布をレヴィ分布と過程することである:

$$w(t) = \frac{1}{\tau} e^{-\frac{t}{\tau}}, \tag{22}$$

$$\lambda(k) \sim e^{-g|k|^\alpha}. \tag{23}$$

こちらの場合も、ガウス分布の場合と同様に長波長展開することを考え、式 (17) の $k, u$ の最低次数まで残すことで、

$$W(k,u) = \frac{1}{u + K_1 |k|^\alpha}, \tag{24}$$

を得る。これを逆ラプラス、逆フーリエすることで、時間と空間を含んだレヴィ分布

$$W(x,t) \sim 2t \sin\left(\frac{\alpha\pi}{2}\right) \Gamma(1+\alpha) |x|^{-\alpha-1}, \tag{25}$$

を得る。

# 3 FFPK(fractional Fokker-Planck Kolmogorov kinetics)

## 3.1 FFPK の導出

ここでは、CTRW を分布の時間発展方程式として捉える、フォッカープランク方程式について記述する。まず、レヴィ分布の項で述べた待機時間分布をベキ分布で与えることを考える。$w(t) \propto t^{\beta}$ であり、$t^{\beta} \leftrightarrow u^{\beta}$ であるから、式 (24) の時間のラプラス変換を $u \rightarrow u^{\beta}$ と書き換えれば、存在確率分布の運動量表記

$$W(k,u) = \frac{1}{u^{\beta} + K_1|k|^{\alpha}}, \tag{26}$$

が求まる。これを式変形することで、

$$\left(u^{\beta} + K_1|k|^{\alpha}\right) W(k,u) = 1 \tag{27}$$

を得る。このとき、関係式

$$u^{\beta}W(k,u) \leftrightarrow \mathrm{D}^{\beta}_{t+}W(k,t), \tag{28}$$

$$|k|^{\alpha}W(k,u) \leftrightarrow -\frac{\partial^{\alpha}}{\partial|x|^{\alpha}}W(x,u), \tag{29}$$

が成り立つことが知られているので、式 (24) は逆変換を用いれば

$$\mathrm{D}^{\beta}_{r+}W(x,t) = \frac{\partial^{\alpha}}{\partial|x|^{\alpha}}W(x,t) + \delta(x), \tag{30}$$

と変換される。
これが CTRW に対応する確率分布に関する連続の式であり、この方程式は fractional 微分を含むフォッカープランク方程式であることから、fractional Fokker-Planck Kolmogorov 方程式と呼ばれる [2][1]。

# 4 FFPK の主な性質

FFPK はベキ分布を示す現象との相性が良いことが知られている。それを以下の例を用いて説明する。ベキ分布を示す現象の中でも興味深いものは、Fluorescence Correlation Spectroscopy(FCS) である。FCS は細胞内のタンパク質の局在に着目した解析方法であり、細胞内のタンパク質の分散を測定することで、空間の分散に対する時間の関係を $< \Delta x^2 > \propto t^{\beta}$ と求めることができる [3]。

[1] 省略されたフォッカープランクの呼び方 FPK は、“Fokker-Planck Kintics” とも書かれる。しかし、FFPK の命名者である Zaslavsky が fractiona FPK を導出した方法は、Kolmogorov 流の確率過程に基づいているため、やはり Kolmogorov を入れて “fractional Fokker-Planck Kolmogorov kinetics” となっているのが妥当である。

興味深いのは、一般に $\beta$ が整数でないことが見いだされていることである[2]。

FCS の基本的な関係式 $< \Delta x^2 > \propto t^\beta$ と FFPK には関係が付く。これは、FFPK として得られた CTRW における粒子の存在確率分布の連続の式から計算できる。初期条件 $\delta(x)$ を除外した FFPK の式 $(\alpha = 2)$ に $x^2$ をかけて[3]、空間全体での積分

$$\int_\Omega \mathrm{d}x\ x^2 \mathrm{D}^\beta_{t+} W(x,t) = \int_\Omega \mathrm{d}x\ x^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} W(x,t), \tag{31}$$

に部分積分を用いれば、式 (31) の右辺は

$$\int_\Omega \mathrm{d}x\ W(x,t) = 1,$$

となる。式の左辺に表れる空間の積分と時間に関する fractional 微分は、独立であるため、式は

$$\mathrm{D}^\beta_{t+} \int_\Omega \mathrm{d}x\ x^2 W(x,t) = 1, \tag{32}$$

と書き換えることができる。fractional 微分方程式 $\mathrm{D}^\beta_{t+} f(t) = 1$ の解は、$f(t) = \mathrm{const} \cdot t^\beta$ であることが知られている。したがって、式 (32) は、

$$\int_\Omega \mathrm{d}x\ x^2 W(x,t) = \mathrm{const} \cdot t^\beta, \tag{33}$$

となる。空間の分散は $< x^2 > \equiv \int_\Omega \mathrm{d}x\ x^2 W(x,t)$ であるのだから、得られた式は、空間の分散が時間の $\beta$ のベキに比例するという関係式

$$< x^2 > = \mathrm{const} \cdot t^\beta \tag{34}$$

を表していることが分かる。

## 参考文献


[1] Metzler et al. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach. Phys Rep (2000) vol. 339 pp. 1-77.

[2] G. M. Zaslavsky. Chaos, fractional kinetics, and anomalous transport. Phys. Rep., 371(6):461?580, December 2002.

[3] M. Weiss et al. Anomalous protein diffusion in living cells as seen by fluorescence correlation spectroscopy. Biophysical Journal, 84(6):4043-4052, June 2003.


[2] FCS はガウス分布のときに得られる揺動散逸 $< \Delta x^2 > \propto t$ に基づいて、$< \Delta x^2 > \propto t^\beta$ の形を仮定することで $\beta$ のベキ数を発見する手法であることから、ガウス分布以外を取る揺らぎに対しては $\beta \neq 1$ となることが容易に推測される。この推測を元に「$\beta$ が整数でなかったのだからタンパク質の分布はベキである」と結論づけるのは、大きな間違いであり、あくまで「タンパク質の分布は通常のガウス分布ではなさそうである」と「揺らぎは白色雑音ではない」という言い方が正しいと考えられる。また、「空間分散と時間の関係」を論じる仮定としてベキを導入しているため、実験を時間と空間ともに十分大きくとって注意深く測定を行わない限り「空間の分散が時間のベキに比例するか？」という疑問に対する明確な答えは与えられない。

[3] ここでは $x - x_0 = \Delta x$ において $x_0 = 0$ を考える。