偏微分方程式とその数値計算

樋口さぶろお

龍谷大学理工学部数理情報学科

計算科学☆演習 II L07(2015-05-22 Fri)

最終更新: Time-stamp: "2015-05-22 Fri 20:18 JST hig"

今日の目標

- 微分方程式が偏微分方程式かどうか判定できる
- 偏微分方程式 (拡散方程式) の数値計算のプログラムを書ける

http://hig3.net

L06-Q1

Quiz 解答:モーメント母関数と確率

1. 関係するのは $\mathrm{e}^{10\lambda}{}_3\mathrm{C}_1(p\mathrm{e}^{\lambda})^1(q\mathrm{e}^{-\lambda})^2$ の項で, 確率は, $3pq^2$.
2. t が奇数のとき, $t = 2t' + 1$ と書くと, 関係するのは $\mathrm{e}^{10\lambda}{}_t\mathrm{C}_{t'}(p\mathrm{e}^{\lambda})^{t'}(q\mathrm{e}^{-\lambda})^{t'+1}$ の項.
   t が偶数のとき, $\mathrm{e}^{9\lambda}$ の項は現れず, 係数は 0.
   よって,

$$P(9, t) = \begin{cases} 0 & (t \text{ が偶数}) \\ \dfrac{t!}{(\frac{t-1}{2})!(\frac{t+1}{2})!} p^{\frac{t-1}{2}} q^{\frac{t+1}{2}} & (t \text{ が奇数}) \end{cases}$$

L06-Q2

Quiz 解答:モーメント母関数

1. 漸化式は, $P(x,t+1) = \frac{3}{9}P(x-1,t) + \frac{1}{9}P(x,t) + \frac{5}{9}P(x+1,t)$, 初項は $P(x,2) = \begin{cases} 1 & (x=3) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$.
2. 漸化式は, $M(\lambda,t+1) = (\frac{3}{9}\mathrm{e}^{\lambda} + \frac{1}{9} + \frac{5}{9}\mathrm{e}^{-\lambda})M(\lambda,t)$, 初項は $M(\lambda,2) = \mathrm{e}^{3\lambda}$ より, 一般項は, $M(\lambda,t) = \mathrm{e}^{3\lambda}(\frac{3}{9}\mathrm{e}^{\lambda} + \frac{1}{9} + \frac{5}{9}\mathrm{e}^{-\lambda})^{t-2}$.
3. $M(\lambda,100)$ の, $\mathrm{e}^{100\lambda}$ の係数を考える. $(\frac{3}{9}\mathrm{e}^{\lambda} + \frac{1}{9} + \frac{5}{9}\mathrm{e}^{-\lambda})^{100-2}$ の $\mathrm{e}^{97\lambda}$ の係数を考えればよく, $P(100,100) = {}_{98}\mathrm{C}_1(\frac{3}{9})^{97}(\frac{1}{9})^1$
4. $\mathrm{E}[X(t)] = \frac{\partial}{\partial\lambda} M(\lambda,t)|_{\lambda=0} = 3 - \frac{2}{9} \times (t-2)$
5. $\mathrm{V}[X(t)] = \mathrm{E}[X(t)^2] - (\mathrm{E}[X(t)])^2 = \frac{68}{81} \times (t-2)$

注:4 のような問では, 効く項が 1 個だけとはかぎらない. 2 個以上の項の和になることもある.

先週までのあらすじ

$\boxed{X(t)\text{ についての問題文}}$ $\overset{\text{プログラミング}}{\rightarrow}$ $\boxed{\texttt{x+=getrandom(getuniform());}}$

$\downarrow$ 頭で意味を考えて書き替え

$\boxed{P(x,t)\text{ の漸化式と初項}}$ $\overset{\text{プログラミング}}{\rightarrow}$ $\boxed{\boxed{\text{今日の話}}}$

$\downarrow$ 形式的な式変形

$\boxed{M(\lambda,t)\text{ の漸化式と初項}}$

$\downarrow$ 等比数列の一般項を求める

$\boxed{M(\lambda,t)\text{ の具体的な式}}$

$\downarrow$ $\mathrm{e}^{\lambda x}$ の係数 $\downarrow$ $\frac{\partial}{\partial\lambda}|_{\lambda=0}$

$\boxed{P(x,t)}$ $\boxed{\mathrm{E}[X^n]}$

ここまで来たよ

1. 略解:モーメント母関数 $M(\lambda,t)$ からの母期待値の計算

2. 偏微分方程式とその数値計算
   - $P(x,t)$ と拡散方程式
   - $P(x,t)$ の数値計算

$P(x,t)$ と拡散方程式

微分の差分近似の復習

$$f(x+\Delta x) - f(x) \simeq f'(x)\Delta x$$

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \to f'(x) \quad (\Delta x \to 0)$$

$$\frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x} \to f'(x) \quad (\Delta x \to 0)$$

$P(x,t)$ や $X(t)$ の漸化式は, $t \rightsquigarrow t+1$, $x \pm 1$ って言ってきたけど, ここでは $t \rightsquigarrow t+\Delta t$, $x \pm \Delta x$ と思おう.

$p = q = \frac{1}{2}$ とすると, 例えば,

$$\begin{aligned} P(x,t+1) =& pP(x-1,t) + qP(x+1,t) \\ \rightsquigarrow P(x,t+\Delta t) =& \frac{1}{2}P(x-\Delta x,t) + \frac{1}{2}P(x+\Delta x,t) \end{aligned}$$

$\pm\Delta t, \pm\Delta x$ を微分で書きたい…

$$
\begin{aligned}
P(x,t+\Delta t) - P(x,t) =& \frac{1}{2}[(P(x+\Delta x,t) - P(x,t)) \\
&\qquad\qquad - (P(x,t) - P(x-\Delta x,t))] \\
\frac{\partial P}{\partial t}(x,t)\Delta t =& \frac{1}{2}\left(\frac{\partial P}{\partial x}(x,t) - \frac{\partial P}{\partial x}(x-\Delta x,t)\right)\Delta x \\
\frac{\partial P}{\partial t}(x,t)\Delta t =& \frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial P}{\partial x}(x,t)\Delta x\right)\Delta x \\
\frac{\partial P}{\partial t}(x,t) =& \frac{1}{2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t}\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}(x,t)
\end{aligned}
$$

熱や濃度のときは $P(x,t)$ でなく, よく $u(x,t)$ で書く. $\frac{1}{2}\frac{(\Delta x)^2}{\Delta t} \rightsquigarrow D > 0$: 拡散定数.

拡散方程式

拡散方程式 (放物型偏微分方程式の典型例)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t)$$

x 軸上を, 熱や溶けた砂糖が伝わっていく.

$u(x,t)$: 時刻 t における, 位置 x の

u: 変数, x, t:独立変数

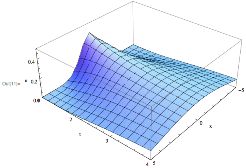
解の例

$u(x,t) = a(2t + x^2) + bx + c$. 確率, 熱, 砂糖の合計が変化しちゃう → 初期条件, 境界条件.

$$u(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2Dt}}$$

偏微分方程式

多変数関数 $u(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ に対する微分方程式で，いろんな独立変数のの偏微分が混ざってるもの $\leftrightarrow$ 常微分方程式 $u'(t) = -2u(t)$. $x''(t) = -x(t)$.
拡散方程式，熱方程式は，偏微分方程式の中でも，放物型といわれるタイプ 現象の数学 A
別のタイプ: 波動方程式, 双曲型 現象の数学 B, ラプラス方程式, 楕円型 太鼓の形



アニメ `http://www.a.math.ryukoku.ac.jp/~hig/course/compsci2_2013/img/pde-diff.cdf`

- 常微分方程式: $x(t)$: 数 x が変化していく
- 偏微分方程式: $u(x,t)$: 関数 $u(x)$ が変化していく

L07-Q1

Quiz(偏微分方程式)

次のうち, 偏微分方程式と呼べるのはどれとどれ?

1. 計算科学 II でやった $P(x,t)$ の漸化式の極限の微分方程式
2. 物理数学 II でやったニュートンの運動方程式 $mx'' = -kx - bx'$.
3. 物理数学 II や数理モデル基礎 I でやった $x'' + ax' + bx = c$.
4. 関数論でやった コーシー-リーマンの関係式
5. 計算科学 I でやったルンゲクッタ法で解ける微分方程式
6. 数理モデル基礎 II でやった, 平衡点のタイプを考えるような連立微分方程式

ここまで来たよ

1. 略解:モーメント母関数 $M(\lambda,t)$ からの母期待値の計算
2. 偏微分方程式とその数値計算
   - $P(x,t)$ と拡散方程式
   - $P(x,t)$ の数値計算

$P(x,t)$ の数値計算

大注意:計算機使うけど $\boxed{}$ じゃない. $\boxed{}$ 不要.
漸化式 $P(x,t+1)=(P(*,t)$ の式$)$ を計算したい.

(rw6,sim6 では横が t, 縦 n(サンプル番号) だったから逆)
$P(x,t)$ を配列 `double u[x]` で表す. 添字 t は?
`for(t)` の中で `u`$=P(x,t)$ を更新していく (ランダムウォークの
`x=x+getrandom(getuniform());` と同じのり)

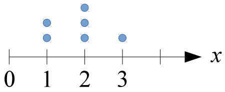
C の配列の復習

```
double u[10]; /*宣言*/

int u[]={0,2,3,1,0,0,0,0,0,0}; /*宣言兼代入*/
```

u[0],u[1],...,u[9] が使える.
u[-1],u[10] にアクセスすると不吉なことが起こる.
代入する前は, 値が 0 である保証はもちろんない.

イメージするための例え話



$U(x,t)$ 人のウォーカーが実際にいる.
数式的 $U(x,t)$: 時刻 t に, 座標 x にいるウォーカーの人数.
上の状況なら
$U(0,t)=0, U(1,t)=2, U(2,t)=3, U(3,t)=1, U(\text{他},t)=0.$

C 的 `U[x]` 座標 x にいるウォーカーの人数 (時刻 t とともに更新)

`int U[10]; /*配列の宣言.` $10-1=x$ `座標の上限*/`

または

`int U[]={0,2,3,1,0,0,...}; /*宣言兼代入*/`

実際の `double u[]` は $1.0/6$ みたいな値.

$u[]$ の更新: u での例え話

$u_{t+1} = (u_t の式), u_0 = 初項$ を解く

```
double u;
double unext;

/* ここで u を初項に従って初期化 */

for(t=0;t<=tmax;t++){
    /* ここで 時刻 t の u を出力 */

    /* 漸化式を適用 */
    unext=(* u の出てくる漸化式右辺 *);
    u=unext;
}
```

u[t] とか使うのは効率悪い.
あれ? u と unext と 2 個あるのは無駄. u=(* u の出てくる漸化式右辺 *); でいいじゃん

$u[]$ の更新: 本番

```
double u[xの範囲の長さ];
double unext[xの範囲の長さ];

/* ここで u[x] を初項に従って初期化 */

for(t=0;t<=tmax;t++){
    /* ここで 時刻 t の u[x] を出力 */

    /* 漸化式を適用 */
    for(x=xmin;x<=xmax;x++){
        unext[x]=(* u[x] の出てくる漸化式右辺 *);
    }
    for(x=xmin;x<=xmax;x++){
        u[x]=unext[x];
    }
}
```

次に出てくる境界条件は無視して書いてます.

u と unext の 2 つが必要. なぜなら…(自分の言葉でどうぞ)

L07-Q2

Quiz(2 項係数の漸化式)

次のランダムウォークの確率の漸化式を考える.

$$P(x,t+1)=\begin{cases}\frac{1}{5}P(x-1,t)+\frac{4}{5}P(x+1,t) & \text{(それ以外)}\\ 0 & (x<-1,x>6)\end{cases},$$

$$P(x,0)=\begin{cases}0.5 & (x=1,3)\\ 0 & \text{(それ以外)}\end{cases}$$

下のような $P(x,t)$ の表を, 漸化式を適用して埋めよう.

$t\backslash x$	-2	-1	0	$+1$	$+2$	$+3$	$+4$	$+5$	$+6$	$+7$
0										
1										
2										

数値計算的悩み

1. 問題 $\rightarrow$ 解決
2. x, t の範囲は正負両方 $\leftrightarrow$ 配列の添字は 0 以上 $\rightarrow$ オフセット
3. x, t の範囲は無限 $\leftrightarrow$ 配列のサイズを宣言 $\rightarrow$ 境界条件

配列の宣言:オフセット

範囲 $x = x_{\mathrm{min}}, \cdots, 0, \cdots, x_{\mathrm{max}}$.
例:$x_{\mathrm{min}} = -10, x_{\mathrm{max}} = 10$
u[-10] とかエラー

```
#define XMAX 10
#define XOFFSET 10  /* ずらし定数. -XMIN より大きめ,
                       境界条件を考えるともっと大きく.*/
double u[XMAX+1+XOFFSET]; /*大きめサイズで宣言.
                       境界条件を考えるともっと大きく.*/
```

$$P(-10,t) \leftrightarrow \text{u[-10+XOFFSET]}$$

$$\vdots$$

$$P(0,t) \leftrightarrow \text{u[0+XOFFSET]}$$

$$P(x,t) \leftrightarrow \text{u[x+XOFFSET]}$$

$$\vdots$$

境界条件

計算機では, しょせん有限範囲
u[xmin+XOFFSET], $\cdots$, u[XMAX+1+XOFFSET] しか計算できない.
しか～し, 端で困る.
unext[xmin+XOFFSET]=
0.5*u[xmin-1+XOFFSET]+0.5*u[xmin+1+XOFFSET];
解決策:
解くべき数学の問題を変更する.

$$P(x,t+1)=\begin{cases}\frac{1}{2}P(x-1,t)+\frac{1}{2}P(x+1,t) & (x_{\mathsf{min}}\leqq x\leqq x_{\mathsf{max}})\\ \text{スペシャルルール} & (x\leq x_{\mathsf{min}}-1)\\ \text{スペシャルルール} & (x\geq x_{\mathsf{max}}+1)\end{cases}$$

`u[xmin-1+XOFFSET],u[XMAX+1+XOFFSET+1]` を強制的に決める
今の場合, `u[xmin-1+XOFFSET]=u[XMAX+1+XOFFSET+1]=0` としておけば, もとの無限領域の問題と似る. 固定境界条件
世の中には, 他に自由境界条件, 周期境界条件,$\cdots$. 端から砂糖を投入, 端は氷に接触, なども表現できる.

微分方程式+初期条件+境界条件の書き方の作法

微分方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = D \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \qquad (x_{\mathsf{min}} < x < x_{\mathsf{max}}, t > 0)$$

初期条件

$$u(x,0) = x \text{ の式} \qquad (x_{\mathsf{min}} < x < x_{\mathsf{max}}, t > 0)$$

境界条件

$$u(x_{\mathsf{min}}, t) = u(x_{\mathsf{max}}, t) = 0 \qquad (t \geq 0)$$

$x_{\mathsf{min}} - 1$ を x_{min} と置き直した.

L07-Q3

Quiz(漸化式)

下の漸化式を計算しようと思って, 間違ったプログラムを書いてしまった. 横 x 縦 t の表で計算結果を書こう. $7 \le x \le 13$ の範囲でいい.

$$P(x,t+1) = \begin{cases} \frac{1}{5}P(x-1,t) + \frac{4}{5}P(x+1,t) & (\text{それ以外}) \\ 0 & (x < -1, x > 20) \end{cases},$$

$$P(x,0) = \begin{cases} 1 & (x = 10) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

```
double u[21];
u[] の 初 期 化;
for(t=0;t<3;t++){
  for(x=1;x<20;x++){
    u[x]=0.2*u[x-1]+0.8*u[x+1];
  }
}
```

お知らせ

Math ラウンジ=チューター
月火水木昼.
Visual Studio の使い方や自宅インストールにも対応できます.
e ラーニング予習問題ふつうのペースにもどります. 2015-05-26 火 23:55 締切
数理情報演習履修説明会
2015-06-24 水 4or5 らしい.

manaba 出席カード提出
`https://attend.ryukoku.ac.jp`

(講義の) プチテストやります!

- 日時 2015-06-05 金 2 90 分
- 講義の 30 ピーナッツ
- 外部記憶ペーパーなしで行きます

出題計画 2015-05-29 金に確定します. 2014 の過去問題とは時期も内容も違うことに注意. 出題について演習と講義の両方から出題します.

- 離散的な確率変数が与えられたとき母平均値, 母分散, 母標準偏差, 母期待値の計算
- 標本が与えられたとき標本平均値, 標本分散, 標本標準偏差, 標本期待値の計算
- ランダムウォークの $P(x,t)$ をいろんな方法で
- ランダムウォークの $\mathrm{E}[X(t)], \mathrm{V}[X(t)]$ をいろんな方法で
- X の規則から P の初項と漸化式を求める
- P の初項と漸化式から M の初項と漸化式を求め, M を求める
- M から確率 P と期待値 $\mathrm{E}[\phi(X)]$ を求める
- C での乱数の使い方
- ランダムウォークの確率シミュレーションの方法とプログラム
- 偏微分方程式の数値計算の方法とプログラム

プログラミングの問題はありますが, Excel や Visual Studio の問題はありません.