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☆実習 B L08(2016-06-06 Mon)

最終更新: Time-stamp: "2016-06-06 Mon 17:17 JST hig"

今日の目標

- 偏微分方程式と, 現象モデリングが説明できる
- ラグランジュ表現とオイラー表現が説明できる
- 複数ランダムウォーカーのラグランジュ表現によるプログラムが書ける

http://hig3.net

L07-Q1

Quiz 解答:ランダムウォークの時間発展

ソースコード 1: マルコフ連鎖の時間発展

```
int multiply_trans(double q[], double p[]){
  int y;
  q[0]=                7.0/10*p[0]+2.0/10*p[0+1];
  for(y=1;y<99;y++){
    q[y]=3.0/10*p[y-1]+5.0/10*p[y]+2.0/10*p[y];
  }
  q[99]=3.0/10*p[99-1]+8.0/10*p[99];
  return 0;
}
```

L07-Q2

Quiz 解答:マルコフ連鎖の母期待値の時間発展

1. 分布の時間発展は,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7}\begin{pmatrix}2\\5\end{pmatrix} + \frac{5}{7}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}(-\tfrac{1}{6})^t.$$

母期待値は

$$\begin{aligned}\mathrm{E}[(X(t))^2] =& \sum_{x=1}^{2} x^2 \cdot p(x,t)\\ =& 1^2(\tfrac{1}{7}\cdot 2 + \tfrac{5}{7}\cdot 1\cdot(-\tfrac{1}{6})^t) + 2^2(\tfrac{1}{7}\cdot 5 + \tfrac{5}{7}\cdot(-1)\cdot(-\tfrac{1}{6})^t)\\ =& \tfrac{22}{7} - \tfrac{15}{7}(-\tfrac{1}{6})^t\end{aligned}$$

今の場合は極限分布が定常分布なので, 母期待値も, $t \to +\infty$ で定常分布 $\vec{u}_1 = \frac{1}{7}\begin{pmatrix}2\\5\end{pmatrix}$ の母期待値 $1^2\cdot\frac{2}{7} + 2^2\cdot\frac{5}{7}$ に収束する.

2. $\vec{p}(\infty) = \frac{1}{7}\begin{pmatrix}2\\5\end{pmatrix}$.
$\log|\vec{p}(t)-\vec{p}(\infty)| = \log\frac{5}{7}\sqrt{2}|-\frac{1}{6}|^t = (-\log 6)t + (\log 5 - \log 7 + \frac{1}{2}\log 2)$.
傾きは第 2 固有値 λ_2 から $\log|\lambda_2|$ で, 切片は初期条件で決まる.

課題の連絡と振り返り

- p051 第 1 固有値は 1, 第 2 固有値が収束の速さ (=グラフの傾き) を決める
  - 定常分布は固有値 1
  - 極限分布があるならそれは定常分布
  - Excel は各自補って．情報リテラシー講座 or `https://moodle.media.ryukoku.ac.jp`
- p052 明日が締切
- p061 頭の整理を後半で
- p062 完成例を前半最後で
- 春のプチテスト (プログラミング) 講評
- チーム課題 実習をやむを得ず欠席するときは事前にチームメンバーと教員の両方に連絡してね
- もう初夏．のプチテスト (2016-06-22 水 3)

ここまで来たよ

3 マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

4 偏微分方程式とその数値計算
- $p(x,t)$ の満たす偏微分方程式
- マルコフ連鎖の数値計算 対 確率シミュレーション

$p(x,t)$ の満たす偏微分方程式

x,t:整数, $p(x,t)$,$X(t)$:数列, $t+1$, $x\pm 1$, 漸化式, って言ってきたけど, $\rightsquigarrow$ x,t:実数, $p(x,t)$ や $X(t)$:関数, $t+\Delta t$, $x\pm\Delta x$, 極限で微分方程式, と思おう.

$$
\begin{aligned}
p(x,t+1) &= \tfrac{1}{2}p(x-1,t)+\tfrac{1}{2}p(x+1,t)\\
\rightsquigarrow p(x,t+\Delta t) &= \tfrac{1}{2}p(x-\Delta x,t)+\tfrac{1}{2}p(x+\Delta x,t)
\end{aligned}
$$

復習:微分の差分近似

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

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

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

$\pm\Delta t, \pm\Delta x$ 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.
左右の推移確率が異なるとき, 移流項 $\frac{\partial p}{\partial x}(x,t)$ も残る.

現象の数理 A

拡散方程式

拡散方程式 (diffusion equation, heat equation)

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

x 軸上を，棒を熱が，水を溶けた砂糖が，空気をにおい分子が，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 $\rightarrow$ 初期条件，境界条件．
- $u(x,t) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2Dt}}$ 有名な解

偏微分方程式 (PDE=partial differential equation)

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偏微分が混ざってるもの　偏微分方程式 (4 年次)

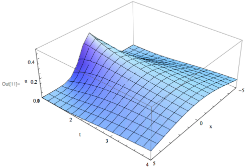
$\leftrightarrow$ 常微分方程式 $u'(t) = -2u(t)$. $x''(t) = -x(t)$.

偏微分方程式の中でも

- 拡散方程式, 熱方程式は, 放物型　現象の数理 A
- 波動方程式は双曲型　現象の数理 B　電気・磁気
- ラプラス方程式は 楕円型　太鼓の形　電気・磁気

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



L08-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 B 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 A 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

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

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

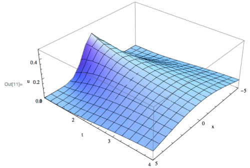
初期条件

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

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.
他に自由境界条件, 周期境界条件,$\cdots$ もある.
端から砂糖を投入, 端は氷に接触, なども表現できる.



$\boxed{\text{偏微分方程式の数値計算}=\text{p062}}$

ここまで来たよ

3 マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

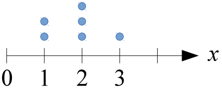
4 偏微分方程式とその数値計算
- $p(x,t)$ の満たす偏微分方程式
- マルコフ連鎖の数値計算 対 確率シミュレーション

実習課題の振り返り:2 つのタイプがあった!

- マルコフ連鎖の数値計算
  - 課題 p051, p061 markov...
  - 母ナントカ 厳密. 1 回だけ計算. $p(x,t)$ は確率 フォッカー-プランク, マスター方程式
  - オイラー表現 場所ごとに確率をカウント
- 確率シミュレーション
  - それ以前の課題 sim11, rw...
  - 標本ナントカ 標本サイズだけ乱数で繰りかえして推定. $X(t)$ は座標 ランジュバン方程式
  - ラグランジュ表現 ウォーカーごとに座標をカウント

ラグランジュ表現

確率は忘れて, ウォーカーが大勢 (下では 6 人) いる状況を考えよう.



ラグランジュ表現

数式的

$x^{(m)}(t)$: ウォーカー番号 m 番の, 時刻 t の座標.

上の状況なら

$x^{(0)}(t) = 1, x^{(1)}(t) = 2, x^{(2)}(t) = 2, x^{(3)}(t) = 3, x^{(4)}(t) = 1, x^{(5)}(t) = 2.$

C 的

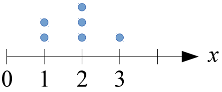
`x[m]` ウォーカー番号 m 番の座標 (時刻 t とともに, この変数を更新)

```
int x[6]; /*配列の宣言*/
```

または,

```
int x[]={1,2,2,3,1,2}; /*配列の宣言兼代入*/
```

オイラー表現



数式的

$P(x,t)$: 時刻 t に, 座標 x にいるウォーカーの人数.
上の状況なら
$P(0,t)=0, P(1,t)=2, P(2,t)=3, P(3,t)=1, P(他,t)=0.$

C 的

`P[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 P[100];` /*配列の宣言. $100-1=x$ 座標の上限*/
または
`int P[]={0,2,3,1,0,0,...};` /*配列の宣言兼代入*/
マルコフ連鎖の計算で使ってる `double p[]` は「いわば」 $p=P/N$,
$N=6$ がウォーカーの合計人数.
注:左端が $x=0$ でないときは, 配列の index をずらす必要.

L08-Q2

Quiz(ラグランジュ表現とオイラー表現)

(座標が整数値のみをとる離散型の) ランダムウォークを考える.
6 羽のペンギンが, 座標 $x = 0, 1, 2, \ldots, 9$ の範囲をランダムウォークする.
ある時刻 t に, $x = 1$ に 2 羽, $x = 3$ に 3 羽, $x = 8$ に 1 羽いるとする.

1. ラグランジュ表現を用いたとき, 配列 `x[]` のサイズはどれだけ必要か. また, 時刻 t に配列の各要素はどのような値をとるか.
2. オイラー表現を用いたとき, 配列 `P[]` のサイズはどれだけ必要か. また, 時刻 t に配列の各要素はどのような値をとるか.

配列のサイズとは, 元の型の変数を何個集めたかという個数. `int x[SIZE];` の `SIZE`.

2 人 (以上) ウォーカーがいるときの確率シミュレーション

同時に歩く 2 人ウォーカーの座標: $X_1(t), X_2(t)$. それぞれ漸化式と初期条件

物理数学 I

```
#define MMAX 2
double x[MMAX];
for(n){ /*サンプル */
  for(m=0;m<MMAX;m++){ /*ウォーカー番号*/
    x[m]=初期位置;
    printf(x[m]);
  }
  for(t){ /* 時間 */
    for(m=0;m<MMAX;m++){ /*ウォーカー番号*/
      x[m]=x[m]+乱数;
      printf(x[m]);
    }
  }
}
```

大注意: $X_m^{(i)}(t)$ $(i = 0, \ldots, N-1, m = 0, 1, \ldots, M-1, t = 0, 1, \ldots, T)$

N は $\boxed{}$ 無関係に N 回のシミュレーションが繰りかえされる. N は試行の回数. i はレース番号=サンプル内データ番号.

M は $\boxed{}$. m はウォーカー番号.

T はランダムウォークの長さ, $\boxed{}$. t は時刻.

母比率の区間推定 sim11 のとき使った.

母期待値の区間推定本当は母分布が正規分布の時だけ使える公式. サンプルサイズが大きいとして, t 分布表の $n-1=\infty$ で正規分布を使った.

正規分布の母平均値の信頼区間

正規分布のサイズ n の標本を考える. 標本平均値 $\overline{X}_{(n)}$, 不偏標本分散 S^2 のとき, 母平均値 μ の信頼係数 $1-\alpha$ の信頼区間は

$$\overline{X}_{(n)} - t_{\alpha/2}(n-1) \times \sqrt{S^2/n} < \mu < \overline{X}_{(n)} + t_{\alpha/2}(n-1) \times \sqrt{S^2/n}$$

ラグランジュ表現とオイラー表現によるプログラムの比較

	ラグランジュ表現	オイラー表現
空間	なんでも	有限個の場所
ウォーカーの区別	あり	なし
得意な問		
シューティング ブロック崩し テトリス ランダムウォーク		

L08-Q3

Quiz(オイラー表現とラグランジュ表現)

次のゲームのオブジェクトのうち, オイラー表現に適したもの (=ラグランジュ表現に適していないもの) を答えよう.

1. シューティングの自機
2. シューティングの雑魚キャラ
3. シューティングのラスボス
4. ブロック崩しの弾
5. ブロック崩しのラケット
6. ブロック崩しのブロック
7. テトリスの落下前のブロック
8. テトリスの落下後のブロック

L08-Q4

Quiz(ラグランジュ表現)

ランダムウォークのラグランジュ表現で，ウォーカーの座標が $X(t)$ の標本が配列 `x[NWALKER]` に格納されているとする．

```
#define NWALKER 6
double x[NWALKER];
```

1. 標本平均値 $\overline{X}$ を計算して `double ex;` に代入するプログラム (の一部) を書こう．
2. $X(t) \leq 5$ の標本比率を計算して `double px;` に代入するプログラム (の一部) を書こう．

両者を同時に計算する 1 個のプログラム (の一部) でもよい．

L08-Q5

Quiz(オイラー表現)

ランダムウォークのオイラー表現, または, マルコフ連鎖の数値解法のプログラムで, 時刻 t において ウォーカーの座標が $X(t) = x$ である確率 $p(x,t)$ が, すでに計算され, 配列 `p[x]` に格納されているとする. ただし, $x = 0, 1, \ldots, 19$.

```
 #define XMAX 20
double p[XMAX];
```

1. 母期待値 $\mathrm{E}[X(t)]$ を計算して `double ex;` に代入するプログラム(の一部) を書こう.
2. 母比率 $P(X(t) \leq 5)$ を計算して `double px;` に代入するプログラム(の一部) を書こう.

両者を同時に計算する 1 個のプログラム (の一部) でもよい.

お知らせ

- 月昼 樋口オフィスアワー (1-502)
- チューター/Math ラウンジ 月火水木昼 1-614
- 初夏のプチテスト 2016-06-22 水 3

https://manaba.ryukoku.ac.jp
マイページの下の方に manaba 出席カード提出

リベンジ機会到来!!!

- 2016-06-22 水 3 初夏のプチテスト (プログラミング)
- 14 ピーナッツ．(旧カリキュラムの人は演習の 28 ピーナッツ/100)
- 春のプチテストと同様の非参照プログラミングのテスト．チームでなく個人別.
- 出題計画 (2016-06-15 水に確定します)．デバッガーはプログラムの完成に役立ちますが, debugger1, 操作方法など, デバッガーの使用が必須な問題は出題しません.
  - マルコフ連鎖の数値計算: 推移確率行列と初期分布が与えられたとき, 時刻 t の分布や期待値を求める．markov01 and/or markovexpect01
  - 単数 and/or 複数ウォーカーの確率シミュレーション: sim11 and/or mrw02
  - もう 1 問?(未定)