

ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算

樋口さぶろお

龍谷大学工学部数理情報学科

計算科学☆実習 B L06(2018-05-22 Tue)

最終更新: Time-stamp: "2018-05-22 Tue 21:53 JST hig"

今日の目標

- 反射, 吸収, 周期壁を説明できる
- ランダムウォークと拡散方程式の関係が説明できる
- 2次元配列を使わずに, `multiply_transf` が書ける



<http://hig3.net>

L05-Q1

Quiz 解答:マルコフ連鎖の時間発展

- ① 転置推移確率行列 M の固有値 $\lambda_1 = 1$ の固有ベクトル \vec{u}_1 を (あるなら) 求めればよい. $M\vec{u}_1 = \vec{u}_1$ を解いて, $\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} s$ ($s \neq 0$). 定常分布は, 規格化された $\vec{u}_1 = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$.
- ② $\vec{p}(1) = M\vec{p}(0) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$.
- ③ 転置推移確率行列 M の固有値 (絶対値の大きさの順に) $|\lambda_1| \geq |\lambda_2|$, 固有ベクトル \vec{u}_1, \vec{u}_2 を求めると,

$$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -\frac{1}{6}, \quad \vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} s, \vec{u}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} s \quad (s \neq 0).$$

固有方程式には解 $\lambda_1 = 1$ があることが最初からわかってるから, 因数分解は楽.

\vec{u}_1, \vec{u}_2 とも $s = 1$ に固定する (他の取り方をしても最終的には同じ $\vec{p}(t)$ が求まる).

$$\begin{aligned}\vec{p}(t) &= M^t \vec{p}(0) \\ &= (UDU^{-1})^t \vec{p}(0) = \begin{pmatrix} \bar{u}_1 & \bar{u}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1^t & 0 \\ 0 & \lambda_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{u}_1 & \bar{u}_2 \end{pmatrix}^{-1} \vec{p}(0)\end{aligned}$$

$U^{-1}\vec{p}(0)$ さえ計算すればいいわけだが、これを $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ とおいてあとで決める方が楽.

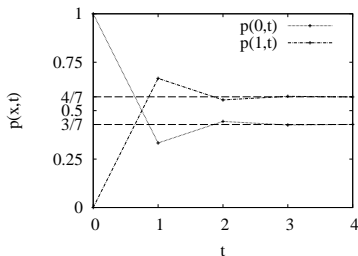
$$\begin{aligned}\vec{p}(t) &= \begin{pmatrix} \bar{u}_1 \lambda_1^t & \bar{u}_2 \lambda_2^t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \\ &= a\bar{u}_1 \lambda_1^t + b\bar{u}_2 \lambda_2^t.\end{aligned}$$

これが $\vec{p}(0)$ と等しくなるように、連立方程式 $\vec{p}(0) = a\bar{u}_1 + b\bar{u}_2$ を解いて a, b を決めると $a = \frac{1}{7}, b = \frac{4}{7}$. よって,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{4}{7} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{6}\right)^t.$$

$t \rightarrow +\infty$ でも $\vec{p}(t)$ が確率ベクトルでありつづけることから, \vec{u}_1 の係数が $\frac{1}{7}$ であること (=この項が確率ベクトルであること) は計算しなくてもわかる.

時間変化. $|\frac{1}{6}| < 1$ なので, $\vec{p}(t) \rightarrow \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ ($t \rightarrow +\infty$)



4

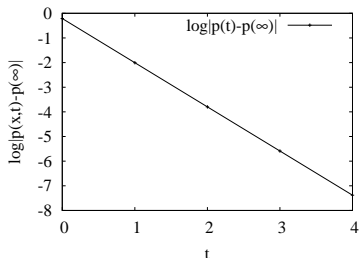
$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{1}{14} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{6}\right)^t$$

極限分布 $\vec{p}(\infty) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ との差の大きさ (ベクトルの長さ) を考えると,

$$\begin{aligned} |\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)| &= \left| \frac{4}{7} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right| - \frac{1}{6} |t| \\ &= \frac{4\sqrt{2}}{7} \left| -\frac{1}{6} \right|^t \end{aligned}$$

$$\log |\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)| = t \times \log \left| -\frac{1}{6} \right| + \log \frac{4\sqrt{2}}{7}$$

よって, t 対 $\log |\text{差}|$ のグラフを描くと, 傾き $\log |\text{第2固有値}|$ の直線になるはず.



状態空間が3点以上からなり、(第2固有値より絶対値が小さい)第3固有値以降がある場合も、 t が大きいところではこの直線に近づいていく。

L06-Q2

Quiz 解答:マルコフ連鎖の定常分布

- 固有値 $\lambda = 1$ の固有ベクトルである確率ベクトルは $\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ のみであり、これが唯一の定常分布

2

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \left(\frac{3}{4}\right)^t + \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \left(\frac{1}{4}\right)^t$$

L06-Q3

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,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} + \frac{4}{7} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \left(-\frac{1}{6}\right)^t.$$

母期待値は

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(X(t) + 1)^2] &= \sum_{x=0}^1 (x + 1)^2 \cdot p(x, t) \\ &= (0 + 1)^2 \left(\frac{3}{7} + \frac{4}{7} \left(-\frac{1}{6}\right)^t\right) + (1 + 1)^2 \left(\frac{4}{7} + \frac{-4}{7} \left(-\frac{1}{6}\right)^t\right) \\ &= \frac{19}{7} - \frac{12}{7} \left(-\frac{1}{6}\right)^t \end{aligned}$$

今の場合は極限分布が定常分布なので, 母期待値も, $t \rightarrow +\infty$ で定常分布 $\vec{u}_1 = \frac{1}{7} \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$ の母期待値 $(0 + 1)^2 \cdot \frac{3}{7} + (1 + 1)^2 \cdot \frac{4}{7}$ に収束する.

②

$$\begin{aligned} P(X(t) > 0) &= \mathbb{E}[\mathbf{1}_{[X>0]}(X)] = (0 \ 1) \vec{p}(t) \\ &= p(1, t) = \frac{4}{7} - \frac{4}{7} \left(-\frac{1}{6}\right)^t \end{aligned}$$

L05-Q4

Quiz 解答:可約なマルコフ連鎖の定常状態

固有値は $\lambda = 1$ (重解) に対応する固有ベクトルは,

$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} s + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} k$ ($s \neq 0$ または $k \neq 0$). 固有値 1 なので, 線形独立な確率ベクトルを 1 組選ぶと便利 (他の選び方でも最終的な結果は変わらない) で, $\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, $\vec{u}_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ とすると, $s\vec{u}_1 + (1-s)\vec{u}_2$ ($0 \leq s \leq 1$) は定常分布.

固有値 $\lambda = \frac{1}{3}$ に対する固有ベクトルは, $\begin{pmatrix} 0 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix} s$ ($s \neq 0$). 確率ベクトルにはなりえないので, 適当に非零ベクトルをひとつ選んで (他の選び方でも最終的な結果は変わらない), $\vec{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ +1 \\ -1 \end{pmatrix}$.

$\vec{p}(0)$ が一般の場合の時間発展は

$$\vec{p}(t) = a\vec{u}_1 1^t + b\vec{u}_2 1^t + c\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t.$$

- ① $\vec{p}(0) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ から a, b, c を定めて,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{2}\vec{u}_1 + \frac{1}{2}\vec{u}_2 + \frac{1}{4}\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t$$

極限分布 $\vec{p}(\infty) = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ は定常分布のひとつ.

- ② $\vec{p}(0) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ から a, b, c を定めて,

$$\vec{p}(t) = \frac{1}{3}\vec{u}_1 + \frac{2}{3}\vec{u}_2 + 0\vec{u}_3 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^t$$

極限分布 $\vec{p}(\infty) = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ は定常分布のひとつ.

- ③ $\{0\}$ と $\{1, 2\}$ が分かれた推移図. すなわち, 可約なマルコフ連鎖である.

ここまで来たよ

5 マルコフ連鎖の時間発展

- マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 中断からの復帰+1 か月戻る:確率シミュレーション

6 ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算

- ランダムウォークの境界条件
- $p(x, t)$ の満たす偏微分方程式
- 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

マルコフ連鎖の時間発展のCでの数値計算 I

状態 $x = 0, \dots, m-1$ の m 状態のマルコフ連鎖を考える.

分布 $\vec{p}(t), p(x, t) \rightarrow$

```

1  double p[m] = {1.0, 0.0, ..., 0.0}; /*配列. m は変数じゃなく整数の定数*/
2  /* {p(0,t), p(1,t), p(2,t), ..., p(m-1,t)} */

```

転置推移確率行列 $M = \begin{pmatrix} p_{00} & p_{01} \\ p_{10} & p_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1 & 0.3 \\ 0.9 & 0.7 \end{pmatrix} \rightarrow$

```

1  double M[][2] = {{0.1, 0.3},
2                  {0.9, 0.7}}; /* 2次元配列 */

```

$\{\{p_{00}, p_{01}\},$
 $\{p_{10}, p_{11}\}\}$

行列とベクトルの積

$$\vec{q} = M\vec{p} \rightarrow q_x = \sum_y M_{xy}p_y.$$

```

1  p[] を p(x,0) で初期化;
2  p を出力;
3  for (t){
4      pn=M p; /*行列とベクトルの積*/
5      p=pn;
6      p を出力;
7  }

```

ここまで来たよ

- 5 マルコフ連鎖の時間発展
 - マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
 - 中断からの復帰+1 か月戻る:確率シミュレーション
- 6 ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算
 - ランダムウォークの境界条件
 - $p(x, t)$ の満たす偏微分方程式
 - 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

ランダムウォークの言葉づかいの習慣

$X(2)$: 初期条件, ランダムウォーカーの出発点 (を確率変数とみたもの)

- 「ランダムウォーカーが時刻 $t = 2$ に $x = 3$ から出発した」 \Leftrightarrow

- 「 $t = 20$ で $x < 0$ にいる」 \Leftrightarrow

$X(T)$: 時刻 T のランダムウォーカーの座標 (を確率変数とみたもの)

$x(T)$: 時刻 T の到達点の座標 (の標本のデータ 1 個)

$(x(0), x(1), x(2), \dots, x(T))$: **パス (path)** (サンプルパス)

$\phi(X(t))$ の標本期待値の C による計算

計算科学☆実習 B(2018)L02

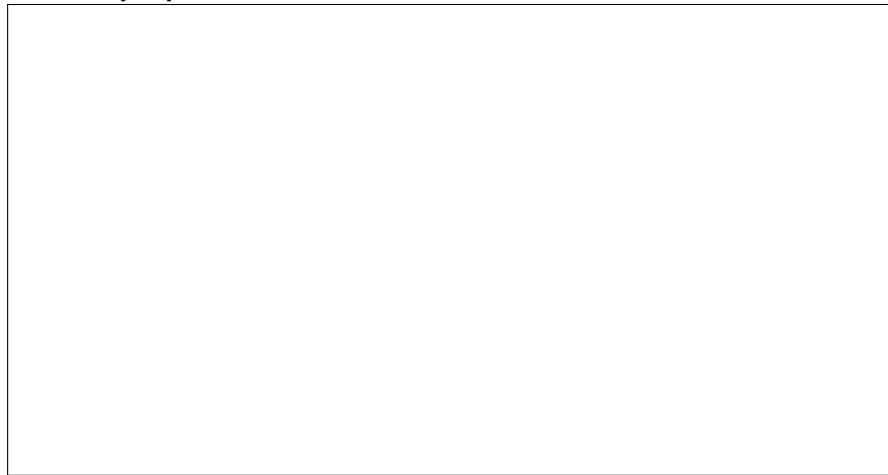
$$\overline{\phi(X(T))} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(X(T)^{(n)})$$

```
1                                     /* 1 */
2  for (n) {
3                                     /* 2 */
4    for (t) {
5                                     /* 3 */
6      x=x+getrandom (getuniform ());
7                                     /* 4 */
8    }
9                                     /* 5 */
10 }
11                                     /* 6 */
```

sum1=0, sum1+=phi(x) (例 $\phi(x) = x^3$), printf("%f", (double)sum1/N)?

標本比率の C による計算

$\phi(x) = \mathbf{1}_{[\text{条件}]}(x)$ に相当する phi は?



sum1 は と名付けたほうがいいかも.

パスの関数 $\phi(X(0), X(1), \dots, X(T))$ の標本期待値も計算できる!

例: $X(0), X(1), \dots, X(T)$ の最大値が 10 以上である母比率を推定したい.

```

1  int path [TMAX];
2                                     /* 1 */
3  for (n){
4                                     /* 2 */
5      for (t){
6                                     /* 3 */
7          x=x+getrandom (getuniform ());
8          path [t]=x;                /* 4 */
9      }
10                                     /* 5 */
11 }
12                                     /* 6 */
13
14 int phi(int path [], int tend){
15     /* path [0] , ... , path [tend] を調べる */
16     return 0; /* or 1 */
17 }

```

sum1=0, sum1+=phi(path,T), printf("%f", (double)sum1/N)?

phi は条件の真偽で 1,0 を返すものでもよい. このときは sum というより count.

ここまで来たよ

- 5 マルコフ連鎖の時間発展
 - マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
 - 中断からの復帰+1 か月戻る:確率シミュレーション

- 6 ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算
 - ランダムウォークの境界条件
 - $p(x, t)$ の満たす偏微分方程式
 - 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

ランダムウォークの2つの表現

1 確率シミュレーション

sim*

ラグランジュ表現

$$X(t) = X(t-1) + R(t), \quad P(R(t) = \pm 1) = \frac{1}{2}. \quad P(X(3) = 9) = 1.$$

$$\downarrow P(X(t) = x) = p(x, t)$$

2 マルコフ連鎖の分布の厳密数値計算

markov

オイラー表現

$$p(x, t) = \frac{1}{2}p(x-1, t-1) + \frac{1}{2}p(x+1, t-1). \quad p(x, 3) = \begin{cases} 1(x=9) \\ 0(\text{他}) \end{cases}$$

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1),$$

ずっと、 $-\infty < X(t) < +\infty$ なつもりで考えていた. 計算機で表現できる?

1 2 int x がオーバーフローするとだめ

2 $p(x, t) = \text{double } p[M]$ で, $0 \leq x < M$ の範囲しか対応できない. $\rightarrow M$ を大きくとって, 範囲をずらせば? \rightarrow しょせんメモリーには上限.

2 ベクトル \vec{p} , 行列 M の端のところをどうする?

端で困る

$$S = \{0, 1, \dots, m-1\}.$$

- $x = 0, x = m-1$ にいるウォーカーには、左(右)に飛ぼうとしたときどうする? \rightsquigarrow とりあえず無視したのが下.

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1)$$

$$h = 1/2, m = 6.$$

$$\begin{pmatrix} p(0, t) \\ p(1, t) \\ \vdots \\ p(m-2, t) \\ p(m-1, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0, t-1) \\ p(1, t-1) \\ \vdots \\ p(m-2, t-1) \\ p(m-1, t-1) \end{pmatrix}$$

転置確率行列になってない! 推移図を描いてみよう

ランダムウォークの端スペシャルルール=境界条件

$1 \leq x \leq m-2$ は普通の場合, 端 $x=0, x=m-1$ は特別 (壁) と思おう.
 $x=0$ でのありうるルール=境界条件. 壁はランダムウォークの時の言葉.

- **吸収壁** $x=1$ から $x=0$ に移ったウォーカーはそれ以降動かない
- **反射壁** $x=1$ から $x=0$ に移ろうとするウォーカーは $x=1$ にもどされる
- **周期 '壁'** $x=1$ から $x=0$ に行こうとしたら $x=m-2$ に飛ぶ (ワープ). $x=0$ と $x=m-2$ は同じ場所. $x=m-2$ から $x=m-1$ に行こうとしたら…

→ X のルールや M を境界条件に合わせて修正.

反射壁, 周期壁では, $x=0, m-1$ は実在しないかのように思って「つめる」ほうがふつう.

壁を分布 p と転置推移確率行列 M の言葉で言うと?

吸収壁

$$\begin{pmatrix} 0 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \end{pmatrix}$$

ディリクレ境界条件 (現象の数理 A) の一

種, $p(0, t) =$ 指定, 固定端 (現象の数理 B)

反射壁

$$\begin{pmatrix} 0 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \end{pmatrix}$$

ノイマン境界条件 (現象の数理 A),

 $\frac{\partial p}{\partial x}(0, t) =$ 指定, 自由端 (現象の数理 B)

周期壁

$$\begin{pmatrix} 0 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h & 0 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & 0 & h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 0 \end{pmatrix}$$

周期境界条件, $p(0, t) = p(m-1, t)$

L06-Q1

Quiz(離散的なランダムウォークの確率の転置推移確率行列)

状態空間 $\{x\} = \{0, 1, 2, 3, 4\}$ 上のランダムウォークの座標 $X(t)$ が、次の漸化式と初期条件で定まる。

$$\begin{aligned} X(t) &= X(t-1) + R(t), \quad (t = 1, 2, \dots) \\ X(0) &= 2 \end{aligned}$$

ここで、 $R(t)$ ($t = 0, 1, 2, \dots$) は独立同分布

$$P(R(t) = r) = \begin{cases} \frac{1}{7} & (r = -1) \\ \frac{4}{7} & (r = 0) \\ \frac{2}{7} & (r = +1) \\ 0 & (\text{他}) \end{cases}$$

にしたがう確率変数である。

ただし、 $x = 0, 4$ が吸収壁であるとする。これをマルコフ連鎖として考える。

- ① 転置推移確率行列 M を書こう。
- ② 推移図を書こう。

マルコフ連鎖とランダムウォーク

(整数座標) ランダムウォークは、マルコフ連鎖の中の単純な特別な一例.

- マルコフ過程

- ▶ マルコフ連鎖 (比較的単純なもの)

- ★ 整数座標ランダムウォーク (状態空間 $S = \{x\}$ が, ユークリッド空間の格子点の構造を持っていて, 転置推移確率行列が空間の近くの点への移動のルールになっていて, ルールが (ほぼ) 空間的に一様であるもの)

- ★ 猫

- ★ 他多数

- ▶ 一般のマルコフ過程

- ★ 連続座標ランダムウォーク (次回くらいから)

- ★ $AR(M)$, $ARMA(m)$, $ARIMA(m)$ モデルは, マルコフ過程の他の例 (もうすぐ出てくる)

ここまで来たよ

- 5 マルコフ連鎖の時間発展
 - マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
 - 中断からの復帰+1 か月戻る:確率シミュレーション

- 6 ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算
 - ランダムウォークの境界条件
 - $p(x, t)$ の満たす偏微分方程式
 - 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

$p(x, t)$ 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, って言うてきたけど,
 $\rightsquigarrow x, t$: 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

$$p(x, t) = \frac{1}{2}p(x - 1, t - 1) + \frac{1}{2}p(x + 1, t - 1)$$

$$p(x, t + 1) = \frac{1}{2}p(x - 1, t) + \frac{1}{2}p(x + 1, t)$$

$$\rightsquigarrow p(x, t + \Delta t) = \frac{1}{2}p(x - \Delta x, t) + \frac{1}{2}p(x + \Delta x, t)$$

復習: 微分の差分近似

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

$$\frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \rightarrow \frac{df(x)}{dx}(x) \quad (\Delta x \rightarrow 0)$$

$$\frac{f(x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} \rightarrow \frac{df(x)}{dx}(x) \quad (\Delta x \rightarrow 0)$$

$\pm\Delta t, \pm\Delta x$ を微分で書きたい…

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

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**.

現象の数理 A

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.
 移動しない ($x \rightarrow x$) 確率が正の時も同様.

拡散方程式

拡散方程式 (diffusion equation, heat equation)

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

初期条件 $u(x, 0) = x$ の関数 $(x_{\min} < x < x_{\max})$

境界条件例えば $u(x_{\min}, t) = u(x_{\max}, t) = 0 \quad (t \geq 0)$ 吸収壁

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, 伝わる

$u(x, t)$: 時刻 t における, 位置 x の

u : 変数, x, t : 独立変数

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

偏微分方程式とは, 多変数関数 $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 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

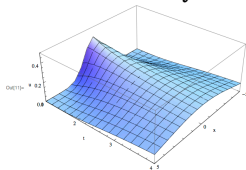
偏微分方程式 (4 年次)

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

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

アニメ [http:](http://www.a.math.ryukoku.ac.jp/~hig/course/compsci2_2013/img/pde-diff.gif)

[//www.a.math.ryukoku.ac.jp/~hig/course/compsci2_2013/img/pde-diff.gif](http://www.a.math.ryukoku.ac.jp/~hig/course/compsci2_2013/img/pde-diff.gif)



線形 2 階偏微分方程式の分類

- 拡散方程式, 熱方程式は, 放物型
- 波動方程式は双曲型
- ラプラス方程式は 楕円型

現象の数理 A

現象の数理 B

電気・磁気

太鼓の形

電気・磁気

印刷版のみ

拡散方程式の解の例 $D > 0$ は拡散定数.

現象の数理 A

- $u(x, t) = a(2t + x^2) + bx + c$. 確率, 熱, 砂糖の合計が変化しちゃう
→ 初期条件, 境界条件.
- $u(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{2Dt}}$ 有名な解. t を固定したとき, 母平均値 0, 母分散 Dt の正規分布 $N(0, Dt)$ の確率密度関数.
- $u(x, t) = e^{-c^2 Dt} \sin(cx)$. ($c \in \mathbb{R}$ は定数)

● 微分方程式とは

● 初期条件とは

● 境界条件とは

L06-Q2

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

L06-Q3

Quiz(偏微分方程式の条件チェック)

t を時間, x を位置とする. 偏微分方程式 (と初期値条件 境界条件)

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) = 2 \times \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) \quad (0 < x < 2\pi)$$

$$u(x, 0) = \sin(3x) \quad (0 < x < 2\pi)$$

$$u(0, t) = u(2\pi, t) = 0 \quad (t \geq 0)$$

を考える.

関数

$$u(x, t) = Ae^{Bt} \sin(Cx)$$

で, $A, B, C \in \mathbb{R}$ を定めて, 上の偏微分方程式と初期条件境界条件を満たすようにしよう.

ここまで来たよ

- 5 マルコフ連鎖の時間発展
 - マルコフ連鎖の時間発展の数値計算
 - 中断からの復帰+1 か月戻る:確率シミュレーション

- 6 ランダムウォークの境界条件・偏微分方程式の数値計算
 - ランダムウォークの境界条件
 - $p(x, t)$ の満たす偏微分方程式
 - 状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

状態数が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算

例: ランダムウォークや偏微分方程式

マルコフ過程の数値計算を使って, 解こう.

$-\infty < x < +\infty$ とは言えないけど, $\bar{p}(t)$ は 100 次元くらいで.

L06-Q4

Quiz(ランダムウォークの時間発展)

次の転置推移確率行列を持つ, 状態空間 $S = \{x\} = \{0, 1, 2, \dots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & & & \ddots & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

```
1 double p[m], q[m];
```

で表される \bar{p}, \bar{q} に対して, 入力 \bar{p} を受け取り $\bar{q} = M\bar{p}$ を計算する関数

```
1 int multiply_trans(double q[], double p[], int m);
```

を書こう. 行列 M を 2次元配列で表現せず, M の規則性を利用して (=加算や代入の回数が $\mathcal{O}(m^2)$ でなく $\mathcal{O}(m)$ となるように) 書くこと.

次元 m が小さいとき

```

1  int multiply_trans(double q[], double p[], int m){
2  int x,y;
3  double M[][NS]={ {0.0,1.0,0.0, /*略*/ ,0.};
4  for (y=0;y<m;y++){
5      q[y]=0;
6      for (x=0;x<m;x++){
7          q[y]+=M[y][x]*p[x];
8      }
9  }
10 return 1;
11 }

```

Quiz 解答:ランダムウォークの時間発展

ソースコード 1: 疎な転置推移確率行列

```

1  int multiply_trans(double q[], double p[], int m){
2  int x;
3  for (x=0;x<m-1;x++){
4      q[x]=1.0*p[x+1]/* +0.0*p[x+2]*/;
5  }
6  q[m-1]=1.0*p[0]
7  return 0;
8  }

```

$$\vec{q} = M\vec{p}.$$

$$q_x = \sum_{y=0}^{m-1} M_{xy}p_y \stackrel{\text{今の場合}}{=} 0 + \cdots + 0 + 1 \times p_{x+1} + 0 + \cdots + 0.$$

疎行列 sparse matrix ほとんどの成分が 0 な行列. 2次元配列でなく, 上のような表現方法をとったほうがよい.

L06-Q5

Quiz(大きな転置推移確率行列をかける関数)

次の推移確率行列を持つ, 状態空間 $\{x\} = \{0, 1, 2, \dots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

$$M = \begin{pmatrix} \frac{7}{10} & \frac{2}{10} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \frac{2}{10} & 0 & & \vdots \\ 0 & \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \frac{2}{10} & 0 \\ \vdots & & \ddots & \frac{3}{10} & \frac{5}{10} & \frac{2}{10} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{3}{10} & \frac{8}{10} \end{pmatrix}.$$

```
1 double p[m], q[m];
```

で表される \vec{p}, \vec{q} に対して, 入力 \vec{p} を受け取り $\vec{q} = M\vec{p}$ を計算する関数

```
1 int multiply_trans(double q[], double p[], int m);
```

を書こう. 行列 M を 2次元配列で表現せず, M の規則性を利用して書くこと.

プチテスト (筆記) やります!

2018-06-05 火 5, 10分 (外部記憶ペーパー作成)+80分 (筆記), 20 ピーナッツ. 配点も範囲も昨年度と異なります. 介護等体験などで欠席する人は事後に届を出せば不利にならないように扱います.

出題計画 プログラミングや乱数の問題はありますが, Visual Studio や Excel や R の問題はありませぬ. 2018-05-29 火 に最終的に確定します.

- (0) 日本語の説明 (1) ランダムウォークの座標の初期条件と漸化式, (2) 確率 $p(x, t)$ の初期条件と漸化式, (3) マルコフ連鎖の推移図と初期分布, (4) マルコフ連鎖の転置推移確率行列と初期条件のどれかが与えられたときどれかを求める $\times n$ 問
- 確率 $p(x, t)$ を求める
 - ▶ 和事象, 積事象で計算する (L03)
 - ▶ 漸化式を使って表を作る (L03)
 - ▶ M を対角化して $\bar{p}(t)$ を求める (L05)
- マルコフ連鎖の用語を正しく使える 定常分布, 極限分布を求められる (L04, L05)
- ランダムウォークの境界条件を, X の漸化式や, 転置推移確率行列 M に反映させられる (L06)
- 拡散方程式の, 初期条件や境界条件の言葉を正しく使え, ある関数が解になっているかを確かめたり, 簡単な場合に解を求めたりできる (L06)
- C の擬似乱数を正しく使う. `srand` と `rand` を使ったプログラムの出力の確率を求められる (L01, L02)
- 母比率や母期待値を推定する確率シミュレーションのプログラムが書ける (`sim11, sim13`)
- 連続型擬似乱数 (L07)

お知らせ

提出場所

<https://learn.math.ryukoku.ac.jp/moodle>



モバイルアプリ

<https://download.moodle.org/mobile>



通信量を抑えられるスキャナアプリ。おすすめ: CamScanner on iOS/Android

<https://www.camscanner.com/>



- チューター/Math ラウンジ 月火水木昼 1-614
- 2018-06-05 火 プチテスト (筆記)
- Visual Studio 自宅インストールおすすめ中. 計算科学☆実習のページから.