ランダムウォークの境界条件・状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の数値計算・偏微分方程式

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(2020-05-27 Wed)

最終更新: Time-stamp: "2020-05-27 Wed 06:51 JST hig"

今日の目標

- 反射, 吸収, 周期壁の境界条件を説明できる
- 2 次元配列を使わずに, multiply_trans が書ける

L07-Q1
Quiz 解答:マルコフ連鎖の時間発展

1. $\vec{p}(1) = M\vec{p}(0) = \frac{1}{3}\binom{1}{2}$.
2. 転置推移確率行列 M の固有値 1 の固有ベクトル $\vec{u}$ を(あるなら)求めればよい. $M\vec{u} = \vec{u}$ を解いて, $\vec{u} = \binom{3}{4} s \quad (s \neq 0)$. 定常分布は, 規格化された $\vec{u} = \frac{1}{7}\binom{3}{4}$.
3. 転置推移確率行列 M の固有値(絶対値の大きさの順に) λ_1, λ_2, 対応する固有ベクトル $\vec{u}_1, \vec{u}_2$ を求めると,

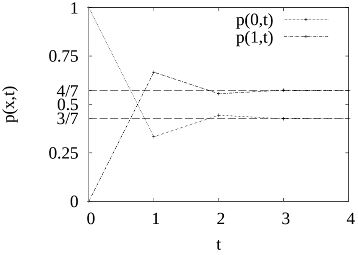
$$\lambda_1 = 1, \lambda_2 = -\frac{1}{6}, \qquad \vec{u}_1 = \binom{3}{4} s, \vec{u}_2 = \binom{1}{-1} s \quad (s \neq 0).$$

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). このとき, $\vec{p}(0) = a\vec{u}_1 + b\vec{u}_2$ で係数 a, b を決めると, $a = \frac{1}{7}, b = \frac{4}{7}$.

$$\begin{aligned}\vec{p}(t) =& M^t \vec{p}(0) \\ =& M^t (a\vec{u}_1 + b\vec{u}_2) \\ =& \lambda_1^t a\vec{u}_1 + \lambda_2^t b\vec{u}_2 \\ =& \tfrac{1}{7}\left(\begin{smallmatrix}3\\4\end{smallmatrix}\right) + \tfrac{4}{7}\left(\begin{smallmatrix}1\\-1\end{smallmatrix}\right)(-\tfrac{1}{6})^t.\end{aligned}$$

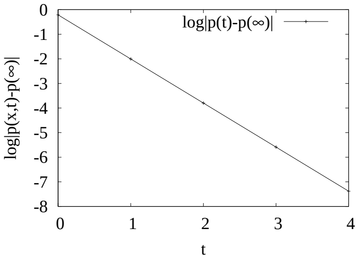
$\vec{u}_1$ の係数が $\frac{1}{7}$ である (=この項が確率ベクトルである) ので, $t \to +\infty$ でも $\vec{p}(t)$ が確率ベクトルでありつづけることが確認できる. (固有値が $\lambda = 1, -\frac{1}{6}$ となった時点で, 第 1 項が確率ベクトルになるはず, ということから, 1 次方程式を解かずに $a = \frac{1}{7}$ と決められたはずだった).
時間変化. $|-\frac{1}{6}| < 1$ なので, $\vec{p}(t) \to \frac{1}{7}\left(\begin{smallmatrix}3\\4\end{smallmatrix}\right) \quad (t \to +\infty)$



4. 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,

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

よって, t 対 $\log|$ 差 $|$ のグラフを描くと, 傾き $\log|$ 第 2 固有値 $|(< 0)$ 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.
さらに t を大きくすると, $|\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)|$ が桁落ちしたり, 数値的に 0 とみなされるなどで, 直線から外れる.

5

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

L07-Q2

Quiz 解答:マルコフ連鎖の定常分布

1. 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. $$\vec{p}(t) = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{6}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\left(\frac{3}{4}\right)^t + \frac{1}{6}\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}\left(\frac{1}{4}\right)^t$$
3. 式でまともに計算すると, 固有ベクトルの内積 $\vec{u}_2 \cdot \vec{u}_3$ とか出てきてたいへん, だけど, $t \to +\infty$ では, $\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)$ の第 3 項が (第 2 項と比べて) 無視できて,
$$\begin{aligned} \log|\vec{p}(t) - \vec{p}(\infty)| &= \log\left|-\frac{1}{6}\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}\left(\frac{3}{4}\right)^t\right| + \text{もっと小さい項} \\ &= t\log\frac{3}{4} + \log\frac{\sqrt{2}}{6} + \text{もっと小さい項} \end{aligned}$$
となる.

L08-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,

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

母期待値は

$$\begin{aligned}\mathrm{E}[e^{X(t)}] &= \sum_{x=0}^{1} e^x \cdot p(x,t)\\ &= \mathrm{e}^0(\tfrac{3}{7} + \tfrac{4}{7}(-\tfrac{1}{6})^t) + \mathrm{e}^1(\tfrac{4}{7} + \tfrac{-4}{7}(-\tfrac{1}{6})^t)\\ &= (\tfrac{3}{7} + \tfrac{4}{7}\mathrm{e})) + \tfrac{4}{7}(1-\mathrm{e})(-\tfrac{1}{6})^t\end{aligned}$$

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 $\vec{u}_1 = \frac{1}{7}\begin{pmatrix}3\\4\end{pmatrix}$ の母期待値 $\mathrm{e}^0 \cdot \frac{3}{7} + \mathrm{e}^1 \cdot \frac{4}{7}$ に収束する.

2

$$P(X(t) > 0) = \mathrm{E}[\mathrm{I}_{[X>0]}(X)] = (0\ 1)\vec{p}(t)$$
$$= p(1,t) = \tfrac{4}{7} - \tfrac{4}{7}(-\tfrac{1}{6})^t$$

L08-Q4

Quiz 解答:可約なマルコフ連鎖の定常状態

固有値 $\lambda = 1$ (重解) に対応する固有ベクトルは,
$\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix} s + \begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix} k \quad (s \neq 0$ 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

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

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

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

   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,

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

   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.

L07-Q5

Quiz 解答:マルコフ連鎖

1. 推移確率行列 T の固有値 λ, 固有ベクトルを求めると,

$$\lambda = 1, \omega, \omega^2$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} s, \begin{pmatrix} 1 \\ \omega \\ \omega^2 \end{pmatrix} s, \begin{pmatrix} 1 \\ \omega^2 \\ \omega \end{pmatrix} s \quad (s \neq 0)$$

定常分布は $\lambda = 1$ に対する固有ベクトルで, 確率ベクトルになるように s を定めると, $\vec{u}_1 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

2. 他の固有値 $\lambda = \omega, \omega^2$ は, $|\omega| = |\omega^2| = 1$ を満たす. よって, 一般には極限分布は存在しない.
   極限分布が存在するのは, $\vec{p}(0) = \vec{u}_1 = \vec{p}(t)$ のように最初から定常分布であったときに限られる.
3. 3 個の状態が 1 方向に回るような推移図.

ここまで来たよ

7 マルコフ連鎖の時間発展

8 ランダムウォークの境界条件・状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の数値計算・偏微分方程式
- ランダムウォークの境界条件
- 状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 偏微分方程式

ランダムウォークの 2 つの表現

$\boxed{1}$ 確率シミュレーション　rw*,sim*　ラグランジュ表現

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

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

$\boxed{2}$ マルコフ連鎖の分布の厳密数値計算　markov*　オイラー表現

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

$$\vec{p}(t) = M\vec{p}(t-1), \quad \vec{p}(3) = \dots.$$

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

$\boxed{1}\boxed{2}$ int x がオーバーフローするとだめ

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

$\boxed{2}$ ベクトル $\vec{p}$ の上下端, 行列 M の上下左右端のところをどうする?

端で困る

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

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

$x = 0, x = m-1$ にいるウォーカーが, 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の M.
$h = \frac{1}{2}$, $m = 6$.

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

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

端 $x = 0, m-1$ での特定のルール=境界条件 壁はウォーカーにとっての言葉

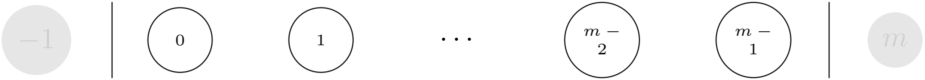
- $x = -1, m$ は実在しない空想上の場所 (配列としても確保しない)
- $x = -1, 0$ の間に壁があり $x = 0$ では特別なことが起こる
- $x = m-1, m$ の間に壁があり $x = m-1$ では特別なことが起こる

- 反射壁 $x = 0$ から $x = -1$ に移ろうとすると $x = 0$ にもどされる.
- 周期 '壁' $x = 0$ から $x = -1$ に移ろうとすると $x = m-1$ に飛ばされる (ワープ). $x = -1$ と $x = m-1$ は同じ場所.
- 吸収壁 $x = 0$ を訪れたウォーカーは壁に吸着され動けなくなる.

$\rightsquigarrow$ $X(t)$ の漸化式や M を境界条件に合わせて修正.

反射壁を転置推移確率行列 M の言葉で言うと?

- 反射壁 $x=0$ から $x=-1$ に移ろうとすると $x=0$ にもどされる. $x=m-1$ から $x=m$ に移ろうとすると $x=m-1$ にもどされる.



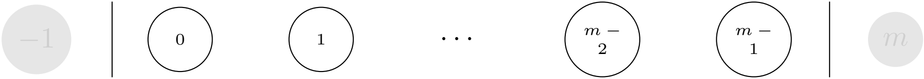
転置推移確率行列を修正しよう.

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

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)

周期壁を転置推移確率行列 M の言葉で言うと?

- 周期 '壁'$x=0$ から $x=-1$ に移ろうとすると $x=m-1$ に飛ばされる (ワープ). $x=m-1$ から $x=m$ に移ろうとすると $x=0$ に飛ばされる. $x=-1$ と $x=m-1$ は同じ場所.



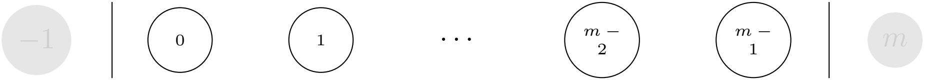
転置推移確率行列を修正しよう.

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

周期境界条件, $p(0,t)=p(m-1,t)$

吸収壁を転置推移確率行列 M の言葉で言うと?

- 吸収壁 $x = 0, m-1$ を訪れたウォーカーは壁に吸着され動けなくなる.



転置推移確率行列を修正しよう.

$$\begin{pmatrix} 1 & h & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h & 0 & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h & 1 \end{pmatrix}$$

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)

L08-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, 次の漸化式で定まる.

$$X(t) = X(t-1) + R(t), \quad (t = 1, 2, \ldots)$$

ここで, $R(t)$ $(t = 0, 1, 2, \ldots)$ 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.

ここまで来たよ

7 マルコフ連鎖の時間発展

8 ランダムウォークの境界条件・状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の数値計算・偏微分方程式
- ランダムウォークの境界条件
- 状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 偏微分方程式

マルコフ連鎖の時間発展の数値計算

$x = 0, \ldots, m-1$ の m 個の状態のあるマルコフ連鎖を考える．

分布 $\vec{p}(t)$, $p(x,t) \to$

```
double p[m]={1.0,0.0,....,0.0}; /*配列. mは整数.*/
/* {p(0,t), p(1,t), p(2,t),...,p(m-1,t)} */
```

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

```
double M[][m]= {{0.1,0.3},
                {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

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

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

サンプル https://www.data.math.ryukoku.ac.jp/course/compscib_2020/p/markov01/src/markov01sample.c

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
マルコフ連鎖の数値計算を使って, 解こう.
$-\infty < x < +\infty$ とは言えないけど, $\vec{p}(t)$ は 100 次元くらいで.
L08-Q2

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 $S = \{x\} = \{0, 1, 2, \ldots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

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

```
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

```
  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

```
int multiply_trans(double q[], double p[], int m){
int x,y;
double M[][NS]={{0.0,1.0,0.0,/*略*/,0,};
for(x=0;x<m;x++){
   q[x]=0;
   for(y=0;y<m;y++){
      q[x]+=M[x][y]*p[y];
   }
}
return 1;
}
```

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

```
int multiply_trans(double q[], double p[],int m){
   int x;
   for(x=0;x<m-1;x++){
      q[x]=/* ... +0.0*p[x-1]+ */1.0*p[x+1]/* +0.0*p[x+2]+...*/;
   }
   q[m-1]=1.0*p[0]
   return 0;
}
```

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

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

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.

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.

L08-Q3

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 $\{x\} = \{0, 1, 2, \ldots, m-1\}$ 上のマルコフ連鎖を考えよう.

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

```
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

```
  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.

ここまで来たよ

7 マルコフ連鎖の時間発展

8 ランダムウォークの境界条件・状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の数値計算・偏微分方程式
- ランダムウォークの境界条件
- 状態空間が大きく規則的なマルコフ連鎖の時間発展の数値計算
- 偏微分方程式

$p(x,t)$ の満たす偏微分方程式

x,t:整数, $p(x,t)$ や $X(t)$:数列, $t+1$, $x\pm 1$, 漸化式, って言ってきたけど,
$\downarrow$
x,t:実数, $p(x,t)$ や $X(t)$:関数, $t+\Delta t$, $x\pm\Delta x$, 微分方程式

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

復習:微分の差分近似

$$
\begin{aligned}
\frac{p(x+\Delta x)-p(x)}{\Delta x} \to& p'(x) \quad (\Delta x \to 0) \\
p(x+\Delta x)-p(x) \simeq& p'(x)\Delta x
\end{aligned}
$$

$\pm\Delta t, \pm\Delta x$ を微分で書きたい⋯

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

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

移動しない $(x \to x)$ 確率が正の時も同様.

左右のジャンプ確率が異なるとき, 移流項 $\frac{\partial p}{\partial x}(x,t)$ が残る.

拡散方程式

拡散方程式 (diffusion equation, heat equation)

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

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

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

棒 (x 軸上) を熱が, コップの水を溶けた砂糖が, 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

拡散方程式 (熱方程式) は, 偏微分方程式の一例.

マルコフ連鎖の数値計算 (の極限)↔ 拡散方程式の数値計算

拡散方程式

拡散方程式 (diffusion equation, heat equation)

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

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

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

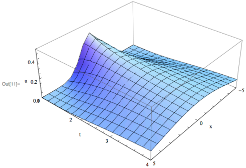
偏微分方程式 (PDE=partial differential equation)

偏微分方程式とは, 多変数関数 $u(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ 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 $u'(t) = -2u(t)$. $x''(t) = -x(t)$.

- 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　　と見られるものもある

アニメ `https://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　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

偏微分方程式を研究してる数理の教員

印刷版のみ

L08-Q4

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

L08-Q5

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 (と境界条件, 初期値条件)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) =& 2 \times \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t) \qquad (0 < x < 2\pi, t \geq 0) \\
u(0,t) =& u(2\pi,t) = 0 \qquad (t \geq 0) \\
u(x,0) =& \sin(3x) \qquad (0 < x < 2\pi)
\end{aligned}
$$

を考える.
関数

$$u(x,t) = A\mathrm{e}^{Bt}\sin(Cx)$$

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.