偏微分方程式と $P(x,t)$ 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(2013-05-22 Wed)

今日の目標

1. $P(x,t)$ の漸化式と, 拡散方程式の関係が説明できる
2. $P(x,t)$ の漸化式を計算するプログラムが書ける

http://hig3.net

ここまで来たよ

1. $P(x,t)$ の生成関数 $Z(\lambda,t)$
   - Quiz 解説
   - 生成関数の定義の復習
   - $Z(\lambda,t)$ を用いた期待値の計算
2. 偏微分方程式と $P(x,t)$ の数値計算
   - $P(x,t)$ と拡散方程式
   - $P(x,t)$ の数値計算

Quiz 解答:$P(x,t)$ の意味

λ は意味を考えないほうがいいパラメタだが, $\mathrm{e}^{\lambda\cdot x}$ という形を考えると, (長さ)$^{-1}$ の次元を持つはず.
Z は確率に $\mathrm{e}^{\lambda x}$ という次元のない数をかけたもの.

Quiz 解答:生成関数

1. $P(x,t+1)=\frac{3}{9}P(x-1,t)+\frac{1}{9}P(x,t)+\frac{5}{9}P(x+1,t)$. $P(x,0)=\delta_{x0}$.
2. 漸化式は, $Z(\lambda,t+1)=(\frac{3}{9}\mathrm{e}^{\lambda}+\frac{1}{9}+\frac{5}{9}\mathrm{e}^{-\lambda})Z(\lambda,t)$, 初項は $Z(\lambda,0)=1$ より, 一般項は, $Z(\lambda,t)=(\frac{3}{9}\mathrm{e}^{\lambda}+\frac{1}{9}+\frac{5}{9}\mathrm{e}^{-\lambda})^t$.
3. $Z(\lambda,2)$ の, e^{λ} の係数を考えて, $P(1,2)=2\cdot\frac{1}{9}\frac{3}{9}$

(1) では, P じゃなく Z の漸化式と初項を求めてね, と言っています. (1) で P, (2) で Z の漸化式を求めてる人多数. 答える場所が違います. P の漸化式は先週済んだから, 独立した問にはしてません.
(3) では, 確率 $\frac{2}{9}\mathrm{e}^{\lambda}$ という人多数. '$(5+x+3x^2)^2$ の x^3 の**係数**は?' ってきかれたら $6x^3$ じゃまずいのでは? 実用的には $\lambda=0$ とおけば $\mathrm{e}^{\lambda}=1$.
(3) では, $Z(1,2)$ を展開する話のときに, いきなり ${}_2\mathrm{C}_1$ が出てくる人がいるけど, $(a+b+c)^t$ の展開だから, 多項係数なのでは?

Quiz 解答:2 項分布でかける $P(x,t)$

1.

位置 x	確率
-2	q^2
0	$2pq$
$+2$	p^2

2.

位置 x	確率
-4	q^4
-2	$4pq^3$
0	$6p^2q^2$
$+2$	$4p^3q$
$+4$	p^4

3. ${}_{10}\mathrm{C}_5 p^5 q^5 = 252 p^5 q^5.$

ここまで来たよ

1. $P(x,t)$ の生成関数 $Z(\lambda,t)$
   - Quiz 解説
   - 生成関数の定義の復習
   - $Z(\lambda,t)$ を用いた期待値の計算
2. 偏微分方程式と $P(x,t)$ の数値計算
   - $P(x,t)$ と拡散方程式
   - $P(x,t)$ の数値計算

生成関数 $Z(\lambda,t)$ の定義の復習

$$\text{生成関数 } Z(\lambda,t) = \sum_{x=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\lambda\cdot x} P(x,t).$$

数列を '関数' にパッケージしたもの.

例 $X_{t+1} = X_t + R_{t+1}$, $R =$ の分布が下の表のとき, $X_0 = 10$ のとき

R	確率
-1	$q = 1-p$
$+1$	p

$$Z(\lambda,t) = \mathrm{e}^{10\lambda}(p\mathrm{e}^{\lambda} + q\mathrm{e}^{-\lambda})^t$$

ここまで来たよ

$Z(\lambda,t)$ を用いた期待値の計算

例 $\mathrm{E}(X_t) = \displaystyle\sum_{x=-\infty}^{+\infty} x \times P(x,t)$

$Z(\lambda,t)$ の式の形が (上のように漸化式を解いて) わかってるとする.

上の $\mathrm{E}(X_T)$ の定義は $Z(\lambda,t) = \displaystyle\sum_{x=-\infty}^{x=+\infty} \mathrm{e}^{\lambda x} P(x,t)$ に似てるけど,

- x 足りない.
- $\mathrm{e}^{\lambda x}$ がじゃま

また誰かの思いついた超絶技巧 $\lambda = 0$ での微分係数.

$$\left.\frac{\partial}{\partial\lambda} Z(\lambda,t)\right|_{\lambda=0} = \left.\frac{\partial}{\partial\lambda}\sum_{x=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\lambda x} P(x,t)\right|_{\lambda=0}$$

$$= \left.\sum_{x=-\infty}^{+\infty} x\mathrm{e}^{\lambda x} P(x,t)\right|_{\lambda=0} = \sum_{x=-\infty}^{+\infty} x \times P(x,t)$$

$Z(\lambda, t)$ からの期待値の計算

一般に期待値は,

$$\mathrm{E}(f(X_t)) = f\left(\frac{\partial}{\partial\lambda}\right) Z(\lambda,t)\bigg|_{\lambda=0}$$

$Z(\lambda,t)$ は親玉みたいなもの

計算例

$$\mathrm{E}(X_t) = \frac{\partial}{\partial\lambda} Z(\lambda,t)\bigg|_{\lambda=0} = \frac{\partial}{\partial\lambda} \mathrm{e}^{10\lambda}(p\mathrm{e}^{\lambda} + q\mathrm{e}^{-\lambda})^t\bigg|_{\lambda=0}$$

答え合わせ まえにやったんだった. $X_0 = 0$ なら, $\mathrm{E}(X_t) = t \times \mathrm{E}(R)$.
$\mathrm{E}(X_t^2) = ?$

2 まではすでにやった問題. 3 からやろう.

Quiz(生成関数)

原点 $x=0$ から出発し, 各時間ステップ t で確率 $\frac{3}{9}$ で x から $x+1$ に, 確率 $\frac{5}{9}$ で x から $x-1$ に移動, 確率 $\frac{1}{9}$ で x にとどまるような, ペンギンのランダムウォークを考える.
時刻 t に, x にペンギンがいる確率を $P(x,t)$ とする.

1. 生成関数 $Z(\lambda,t)=\displaystyle\sum_{x=-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\lambda x}P(x,t)$ の満たす漸化式と, 初項を求めよう.
2. 生成関数 $Z(\lambda,t)$ を求めよう.
3. 生成関数を展開して, $P(1,3)$ を求めよう.
4. 母平均値 $\mathrm{E}(X_t)$ を求めよう.

Quiz(生成関数)

ランダムウォークの座標 X_t の生成関数が $Z(\lambda,t)=(\frac{1}{3}\mathrm{e}^{\lambda}+\frac{2}{3}\mathrm{e}^{-\lambda})^t$ であるとき, 母平均 $\mathrm{E}(X_t)$ を求めよう.

ここまで来たよ

1. $P(x,t)$ の生成関数 $Z(\lambda,t)$
   - Quiz 解説
   - 生成関数の定義の復習
   - $Z(\lambda,t)$ を用いた期待値の計算
2. 偏微分方程式と $P(x,t)$ 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

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

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

微積分, 数値計算法

漸化式での更新は, $t \rightsquigarrow t+1$, $x \rightsquigarrow x \pm 1$ って言ってきたけど, ここでは $t \rightsquigarrow t+\Delta t$, $x \rightsquigarrow x \pm \Delta x$ と思おう.
$p = q = \frac{1}{2}$ とすると, 例えば,

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

$\pm\Delta t, \pm\Delta x$ を微分で書きたい…

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

熱や濃度のときは $P(x,t)$ でなく, よく $u(x,t)$ で書く.

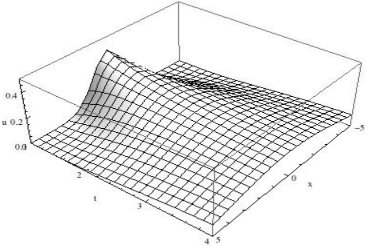
拡散方程式 (放物型偏微分方程式の典型例)

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

$D > 0$:拡散定数

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 $u'(t) = -2u(t)$.
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.

- 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

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 (のある極限)
2. 物理数学 II でやったニュートンの運動方程式
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
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. $P(x,t)$ の生成関数 $Z(\lambda,t)$
   - Quiz 解説
   - 生成関数の定義の復習
   - $Z(\lambda,t)$ を用いた期待値の計算
2. 偏微分方程式と $P(x,t)$ 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 $\boxed{}$ の計算じゃない.

$\boxed{}$ 不要.

漸化式 $P(x,t+1) = (P(*,t)$ の式) を計算して, 横 x, 縦 t の $P(x,t)$ の表で出力したい.

(rw6,rw7 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 p[x]` で表す. 添字 t は?

現在の時刻の p=$P(x,t)$ 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)

数値計算的悩み → 解決

1. x,t の範囲は正負両方 ↔ 配列の添字は 0 以上 → オフセット
2. x,t の範囲は無限 ↔ 配列のサイズを宣言 → 境界条件

オフセット

範囲, $x = x_{\mathrm{min}}, \cdots, 0, \cdots, x_{\mathrm{max}}$ で, 例えば $x_{\mathrm{min}} = -10$ のように x が負のところも考えたい.

p[-10] とかエラー

```
#define XOFFSET 10 /* ずらし定数. -XMIN=-x の最大より大きめ,
                          境界条件を考えるともっと大きく.*/
double p[XMAX+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.*/
```

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

$$\vdots$$

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

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

プログラムの全体

```
double p[XMAX+XOFFSET];
double pnext[XMAX+XOFFSET];

/* ここで p[x] を初項に従って初期化 */

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

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

次に出てくる境界条件は無視して書いてます.

p と pnext の 2 つが必要. なぜなら…(自分の言葉でどうぞ)

境界条件

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

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

p[xmin-1+XOFFSET],p[xmin+1+XOFFSET] を強制的に決める
今の場合, p[xmin-1+XOFFSET]=p[xmin+1+XOFFSET]=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,$\cdots$

Quiz($P(x,t)$ の数値計算)

次のランダムウォークの確率の漸化式を考える.

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

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

下のような $P(x,t)$ の表を, 漸化式を適用して埋めよう.

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

予習復習問題これからは毎週

- 金 11:05 締切の予習復習問題は RaMMoodle `http://el.math.ryukoku.ac.jp/moodle` → 計算科学 II(講義) でやってね.
- 水 13:35 締切の予習復習問題は RaMMoodle `http://el.math.ryukoku.ac.jp/moodle` → 計算科学演習 II でやってね.
- RaMMoodle にはスマートフォンからもアクセスできます. `http://hig3.net` > Links > RaMMoodle.

自宅で演習の課題をやろう Visual Studio には Express Edition という '無料版' があります. 数理情報学科の学生は DreamSpark 経由で Visual Studio 製品を自宅で使えます.
`https://www.a.math.ryukoku.ac.jp/dreamspark/`

演習の休講/補講計画
2013-07-26 金 2 を予備日 (休講候補), 2013-07-05 金 3(ここは休講する総合演習の裏) に補講の予定. インフルエンザや台風が来て全学休講が発生したら再変更あり

講義のプチテストやります!

- 2013-06-05 水 3, 90 分, 30 ピーナツ, 参照相談なし. 紙のテスト.
- 過去問は公開してるけど, 今年の Quiz や下の出題計画のほうがまだ参考になるかも.
- 出題計画 (2013-05-29 水 3L08 で詳細化・確定します)
  - 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 $\mathrm{E}(X_T), \mathrm{V}(X_T)$ の性質
  - ラグランジュ表示とオイラー表示
  - ランダムウォークのルールから, 確率 $P(x,t)$ の初期条件と漸化式を求める
  - $P(x,t)$ の初期条件と漸化式から, 生成関数 $Z(\lambda,t)$ の初期条件と漸化式を求める
  - 生成関数 $Z(\lambda,t)$ から, 確率, 平均値を求める
  - 連続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 (L08)