偏微分方程式・ランダムウォークと拡散方程式

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(2021-05-27 Thu)

最終更新: Time-stamp: "2021-05-29 Sat 08:29 JST hig"

今日の目標

- ランダムウォークと拡散方程式の関係が説明できる
- 偏微分方程式, 初期条件, 境界条件が説明できる
- 拡散方程式の数値計算が説明できる

L07-Q1
Quiz 解答:離散的なランダムウォークの確率の転置推移確率行列

1. $$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{7} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & \frac{1}{7} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{2}{7} & \frac{4}{7} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{7} & 1 \end{pmatrix}$$
2. 略

L08-Q2
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]+0.0*p[x]+*/1.0*p[x+1]/*+0.0*p[x+2]+..*/;
  }
  q[m-1]=1.0*p[0]
  return 0;
}
```

L08-Q3

ここまで来たよ

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

8 偏微分方程式・ランダムウォークと拡散方程式
- 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.

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)

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

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

境界条件例えば $u(x_{\min},t) = u(x_{\max},t) = 0 \qquad (t \geq 0)$ 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 **温度，濃度**

u: **従属**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)$\leftrightarrow$ 拡散方程式の数値計算

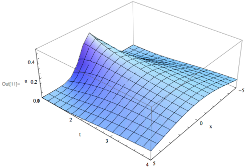
偏微分方程式 (PDE=partial differential equation)

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

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 $\qquad (x_{\mathsf{min}} < x < x_{\mathsf{max}})$

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

$D > 0$ は拡散定数.

現象の数理 A

拡散方程式は線形. 解の線形結合は解 (境界条件はそのたびチェック).

拡散方程式 (diffusion equation, heat equation)

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

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

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

$D > 0$ は拡散定数.

現象の数理 A

拡散方程式の解の例

- $u(x,t) = a(2Dt + x^2) + bx + c$. 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. t を固定したとき, 母平均値 0, 母分散 Dt の正規分布 $\mathrm{N}(0, Dt)$ の確率密度関数.
- $u(x,t) = \mathrm{e}^{-c^2 Dt} \sin(cx)$. ($c \in \mathbb{R}$ は定数)

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

L08-Q2

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.

L08-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

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

を考える.
関数

$$u(x,t) = \mathrm{e}^{-18t}\sin(3x) \tag{8.1}$$

は, 偏微分方程式そのもの, 初期条件, 境界条件のうち, どれを満たし, どれを満たしていないか答えよう.