

反応拡散系に対する 大域的解構造の数値計算法

応用数学勉強会@神戸大学
2014年12月11日～13日

長山雅晴
北海道大学電子科学研究所, JST CREST

共同開発者
矢留雅亮, 上田肇一
マニュアル製作者
金沢大学時代の学生さん

大域的分岐計算といえは

Auto :

常微分方程式の解構造の数値計算ならもってこい！

定常解，周期解の解構造もOK.

もちろん安定性もチェック可能！

注) とくとき周期解の安定性を間違えることあり！

周期解の計算精度の問題

ヘテロクリニック軌道，ホモクリニック軌道も計算できる

→ 進行波の解構造が計算できる場合がある.

空間構造に急激な変化のある解は難しい.

例：ある双安定反応拡散系の界面運動を 記述するモデル方程式

$$\begin{cases} m(\dot{z}_L)\ddot{z}_L - n(z_R - z_L, -\dot{z}_R)\ddot{z}_R = \\ \quad -1 + 2a + M(z_R - z_L, -\dot{z}_L, -\dot{z}_R) - N(\dot{z}_L; \tau), \\ m(\dot{z}_R)\ddot{z}_R - n(z_R - z_L, \dot{z}_L)\ddot{z}_L = \\ \quad 1 - 2a - M(z_R - z_L, \dot{z}_R, \dot{z}_L) - N(\dot{z}_R; \tau), \end{cases}$$

z_L, z_R は界面の位置を表す.

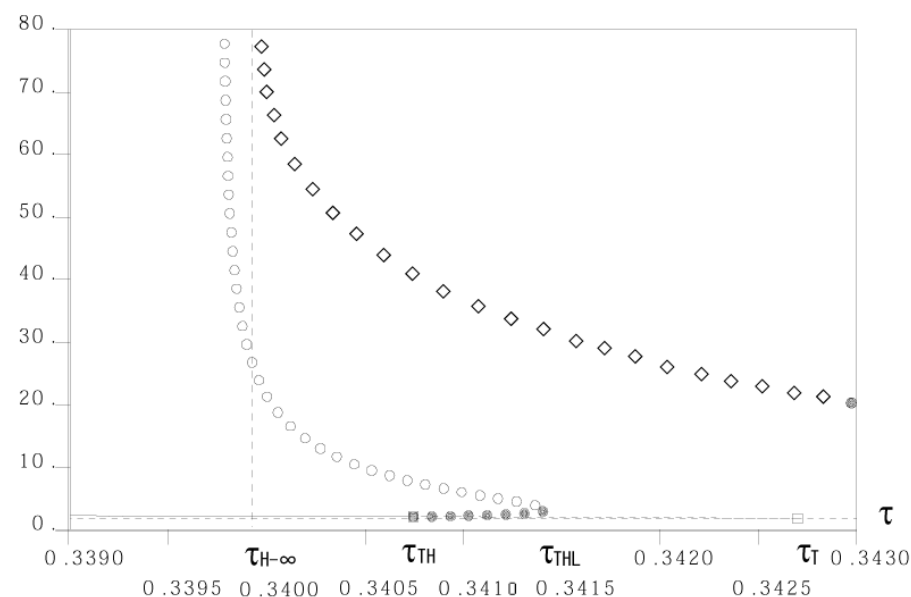
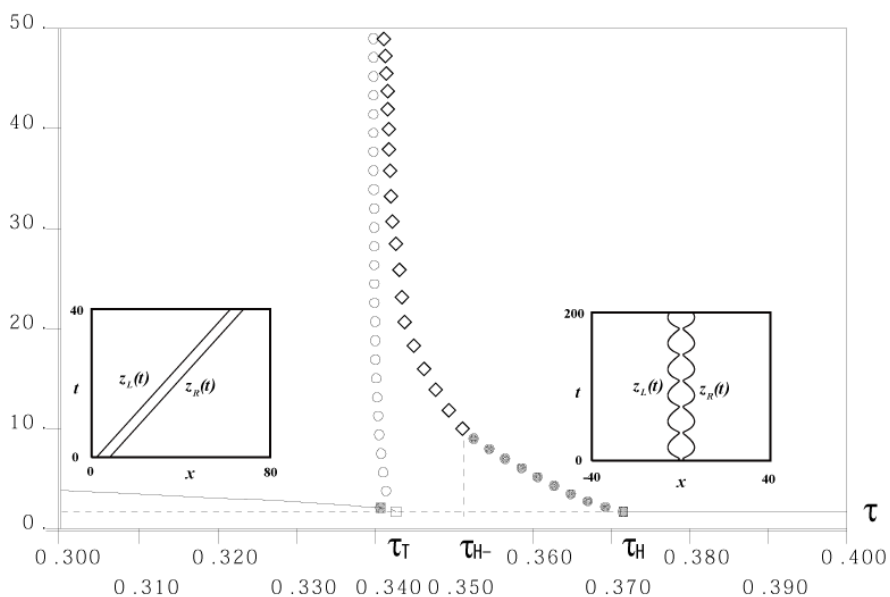
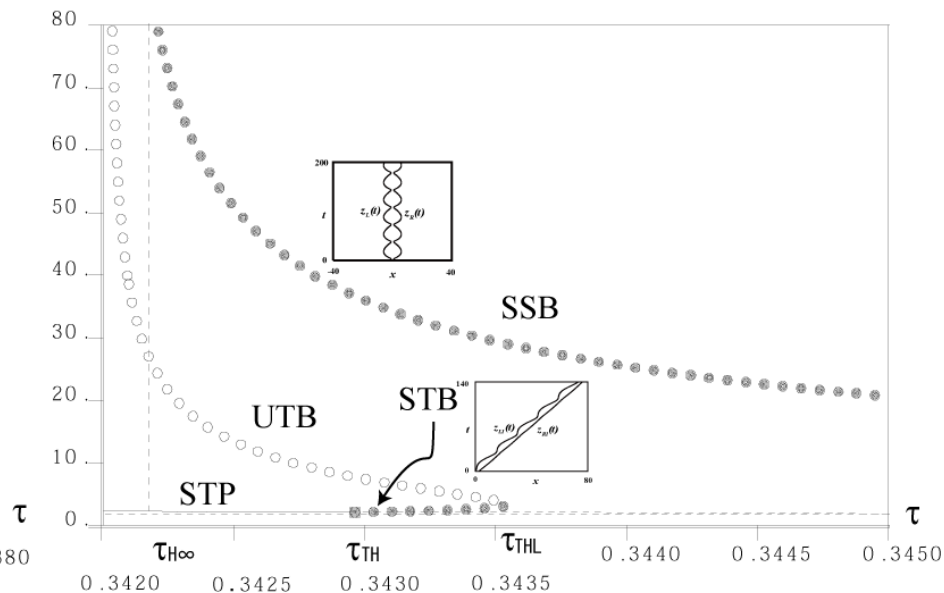
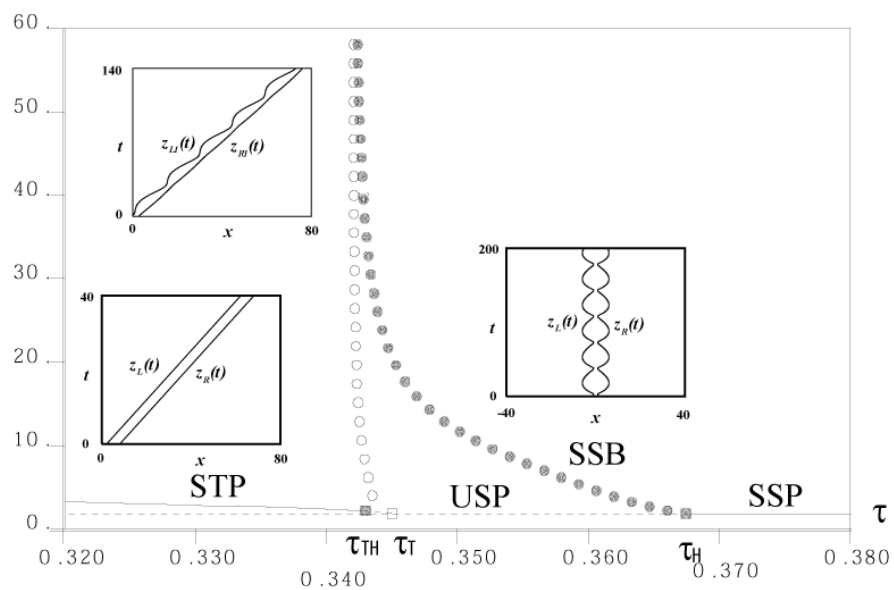
$$x(t) = \frac{z_R(t) + z_L(t)}{2} : \text{界面の位置}$$

$$y(t) = \frac{z_R(t) - z_L(t)}{2} : \text{界面の幅}/2$$

によって方程式を書き換えたのち, AUTO によって
分岐解析を行う.

M.Mimura, M.N., T.Ikeda and H.Ikeda

分歧解析結果

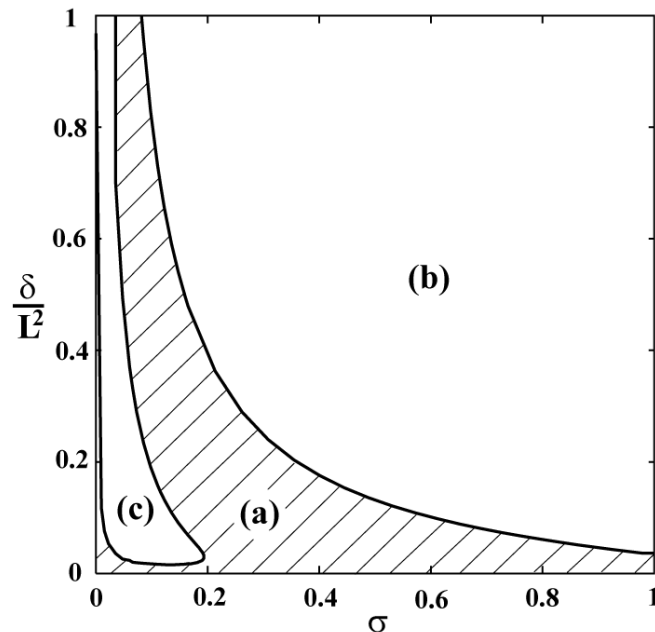


例：結合振動子の引き込み

$$C \frac{dT_i}{dt} = \omega_1 h_1 (T_0 - T_i) + \omega_1 \beta a n_i \exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right) + \sigma \left(\frac{\delta}{L^2} T_j^4 - T_i^4 \right)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = \omega_2 h_2 (n_0 - n_i) - \omega_2 a n_i \exp\left(-\frac{E}{RT_i}\right)$$

ただし, $L = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|$, $i, j = 1, 2$



すべての領域で同位相同期解は安定である
領域(a)で逆位相同期解と同位相同期解が
双安定となっている

AUTOでできる反応拡散系の数値計算

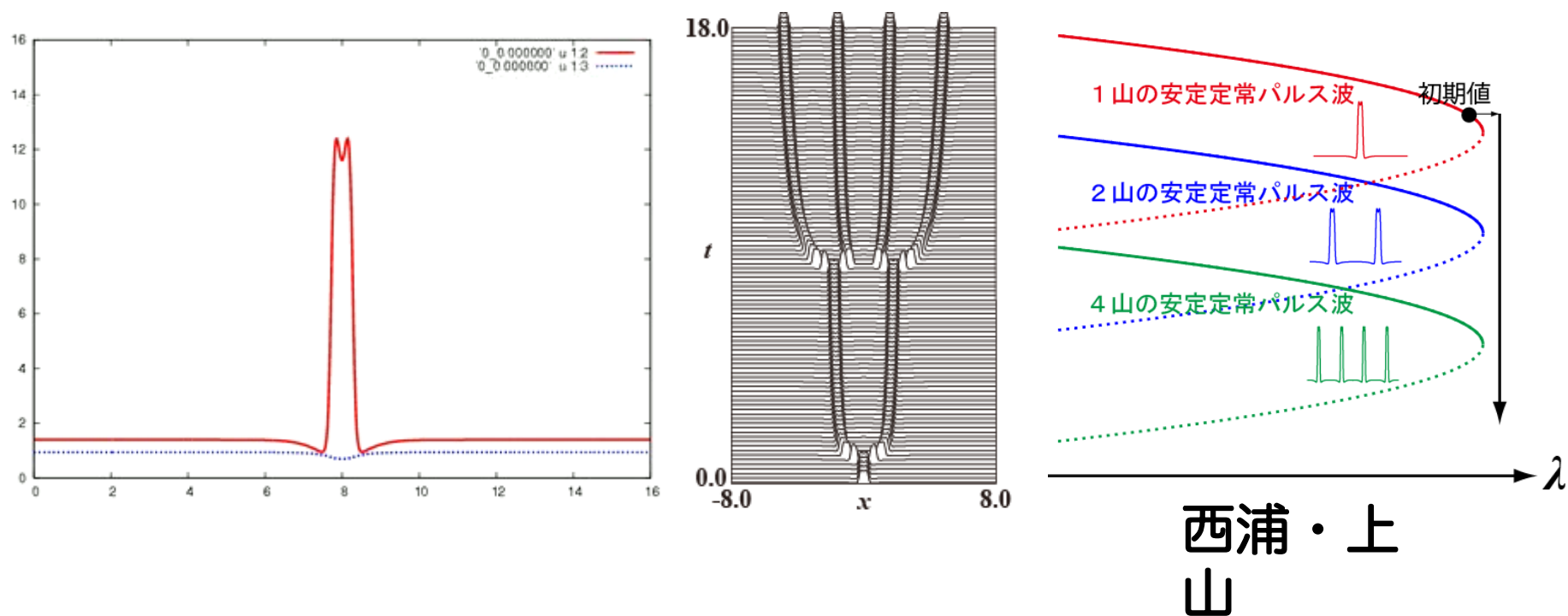
進行波解の解構造

$$u_t = du_{xx} + u - u^3.$$

$$\begin{cases} u_t = du_{xx} + u(1 - u - bv), \\ v_t = v_{xx} + v(1 - au - v). \end{cases}$$

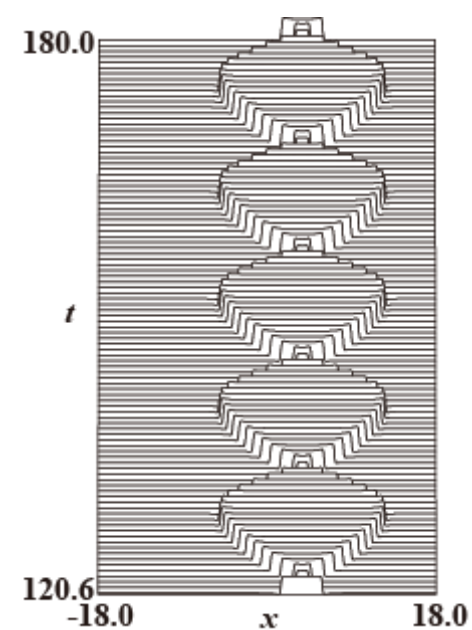
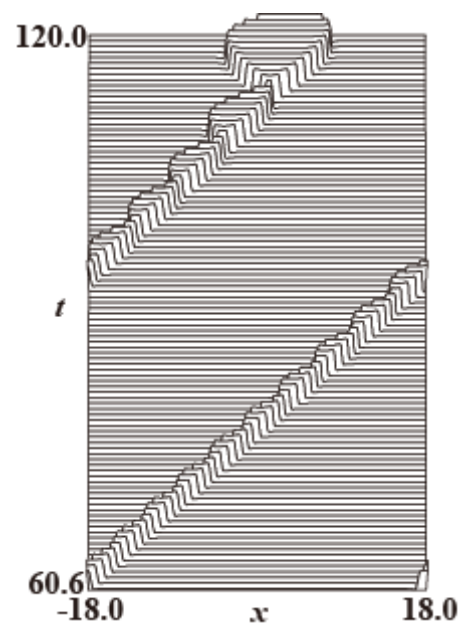
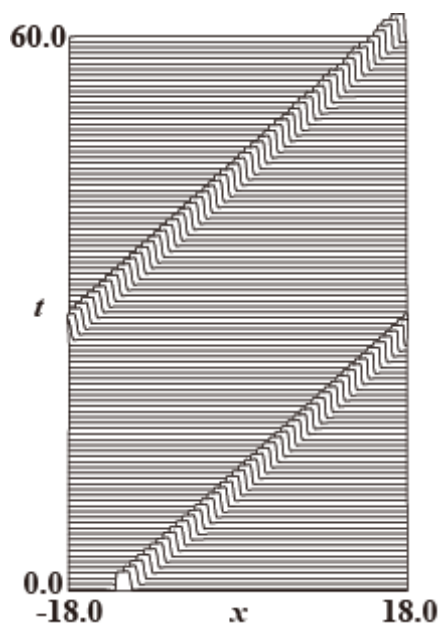
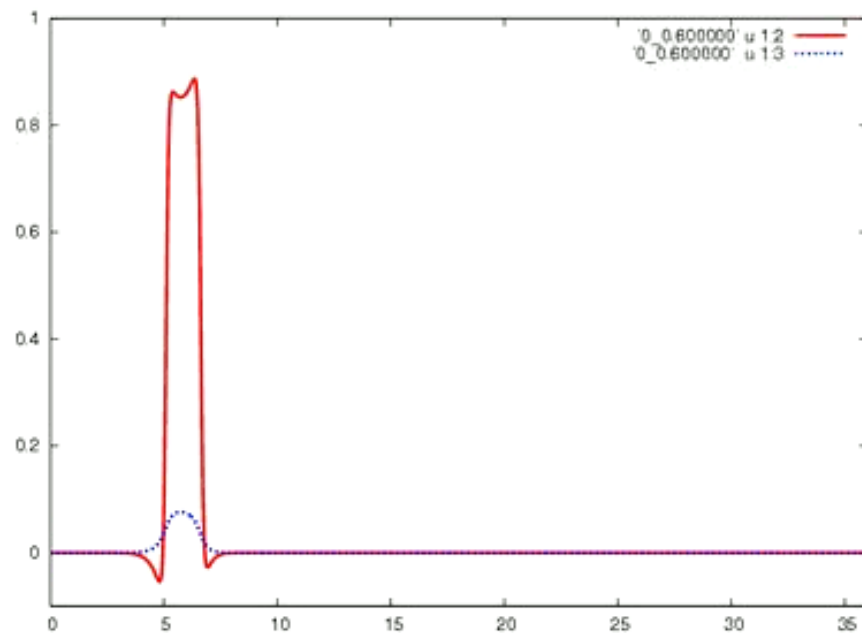
反応拡散系の遷移パターンの理解

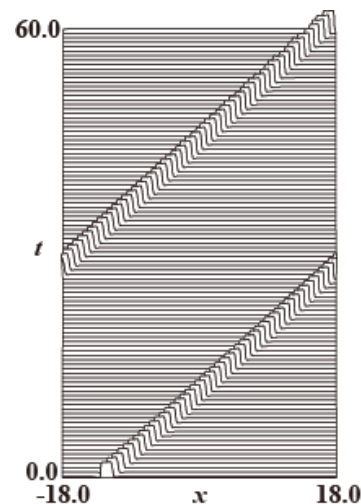
定常パルス波の分裂過程



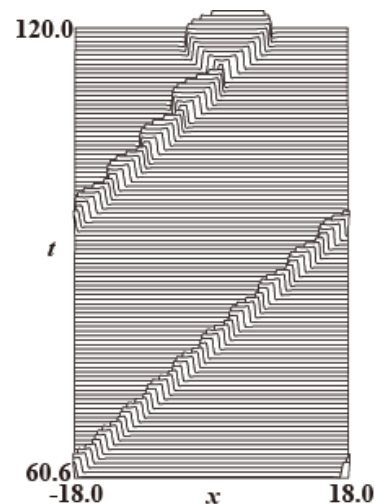
定常パルス解の解構造：サドル・ノード分岐の列

双安定反応拡散系に現れる遷移パターン

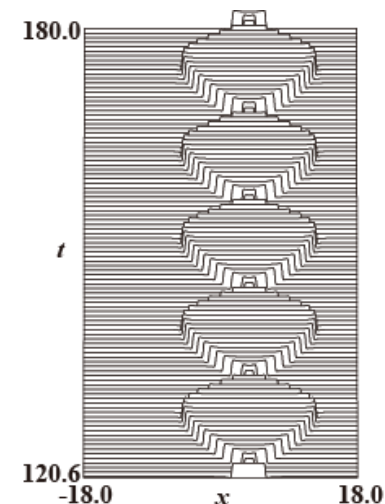




進行パルス波



脈動進行パルス波



脈動定常パルス波

ホップ分岐の影響？ サドル・ノード分岐の余韻？

パターンの遷移ダイナミクスを理解するには
大域的分岐構造の情報が重要！

AUTOを用いて大域的分岐構造を求めてみよう！

計算できるかな！？

AUTOの問題点

システムサイズ（ODEの次元数）が大きい場合（400次元以上）：
数値計算が困難（計算量が多すぎ、特に周期解はしんどい）

→

反応拡散系の空間を離散化して得られる微分方程式系の次元は非常に大きくなる.

特に内部遷移層を持つ解の構造を調べるためには、経験上1000次元以上必要になる.

→

AUTOを用いることは困難（AUTO2000までは）
ただし、Gray-Scottモデルのように次元が200程度で収まるならAUTOを用いることも可能（西浦－上山；定常解の構造）
周期解も次元が100程度なら可能なはず.
最近のAUTOの開発状況を知らないので、もしかしたらすべてAUTOでできるかもしれない.

目的

1. 反応拡散系に対する大域的分岐構造の数値計算法を開発
AUTOのよいところは使う。
周期解の計算は別の方法を使う。
2. 開発した数値計算法を用いて遷移パターンの解明
矢留君の課題でした

目標

$$u_t = Du_{xx} + f(u), \quad t > 0, \quad x \in I,$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad x \in \bar{I}.$$

+ 境界条件

に対する大域的分岐構造を数値計算するための
分岐数値計算法を考える.

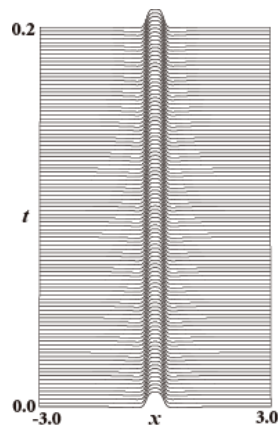
反応拡散系

$$U_t = D \Delta U + F(U)$$

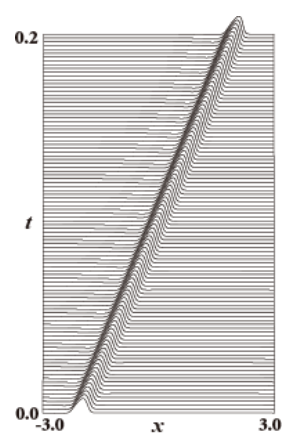
拡散項

反応項

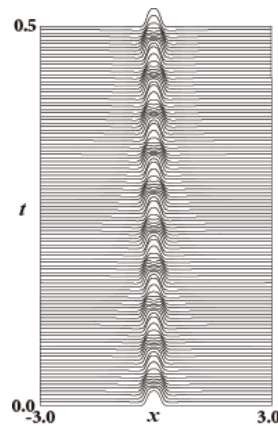
パルス系



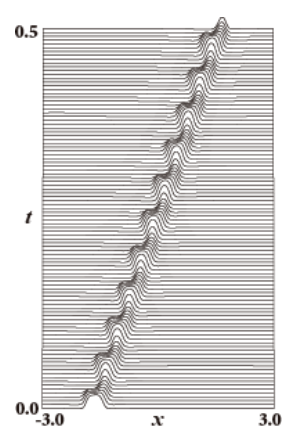
定常パルス波



進行パルス波

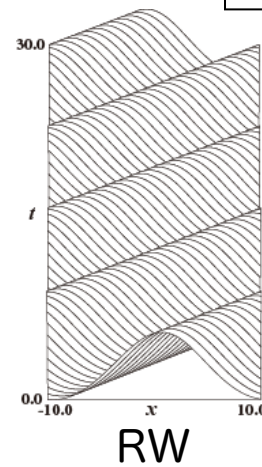


脈動定常パルス波

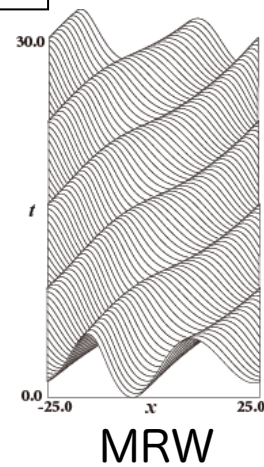


脈動進行パルス波

RW系

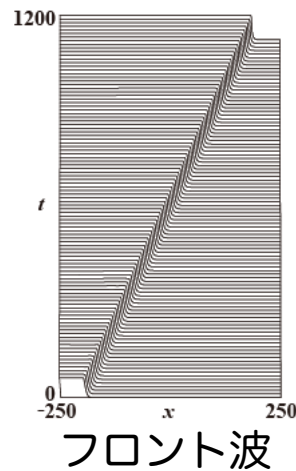


RW

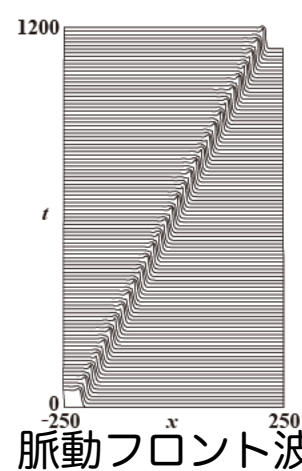


MRW

フロント系

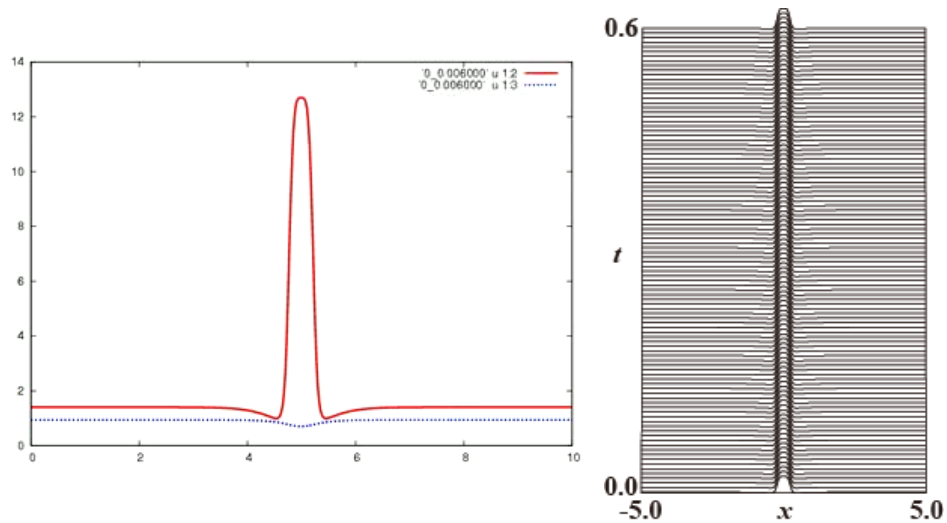


フロント波

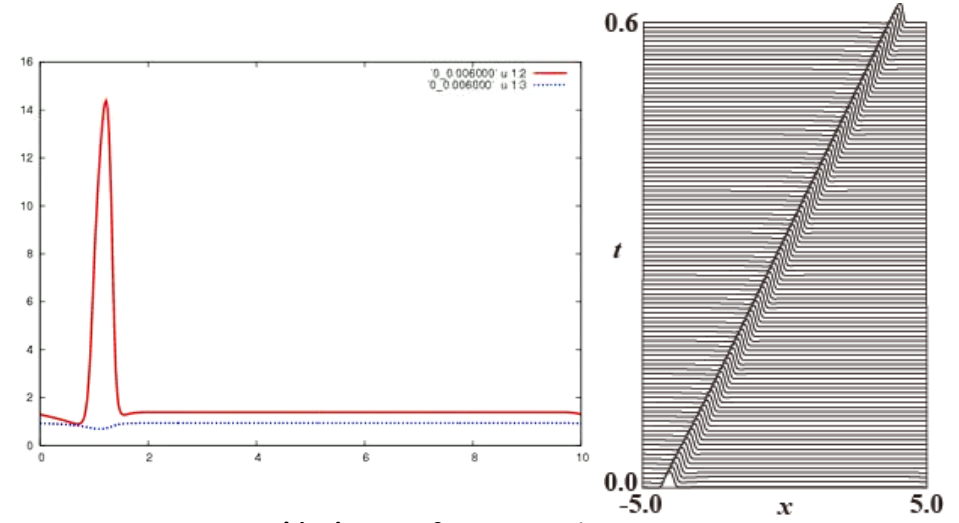


脈動フロント波

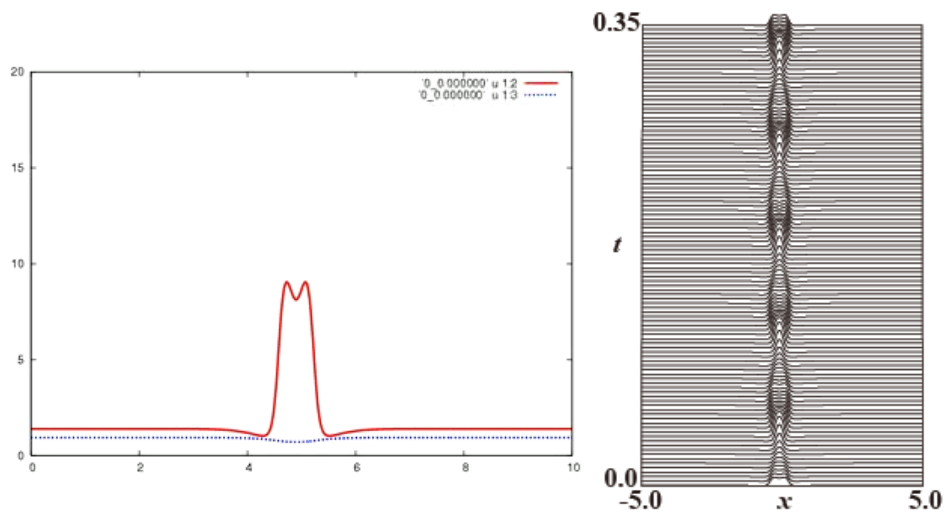
反応拡散系に現れるパルス波



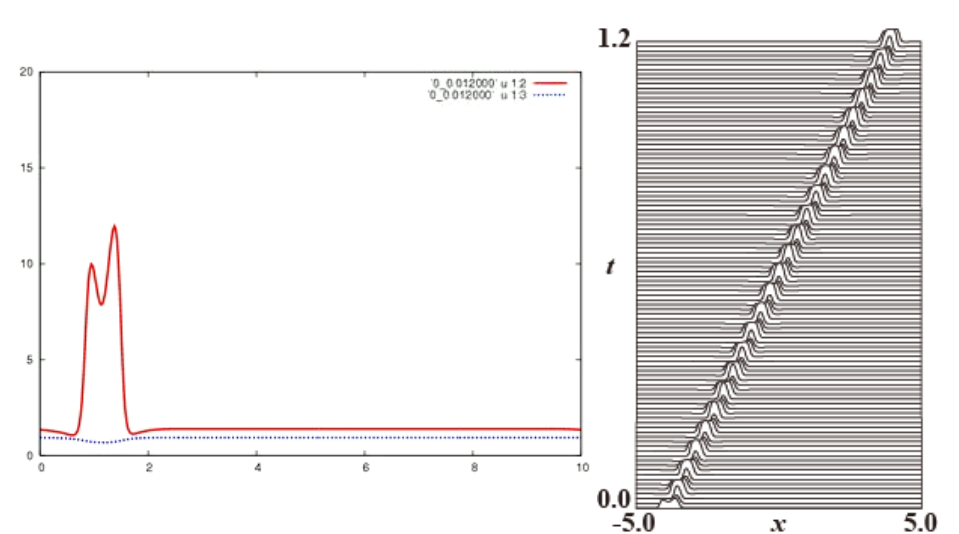
定常パルス波



進行パルス波

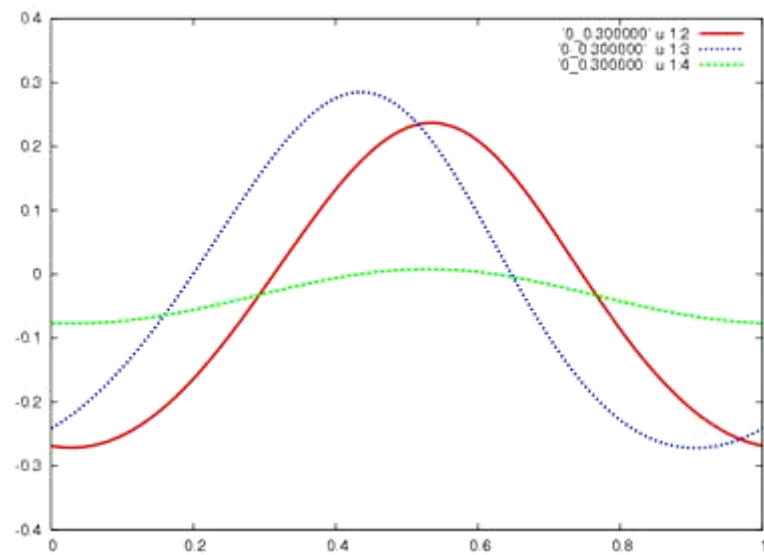


脈動定常パルス波

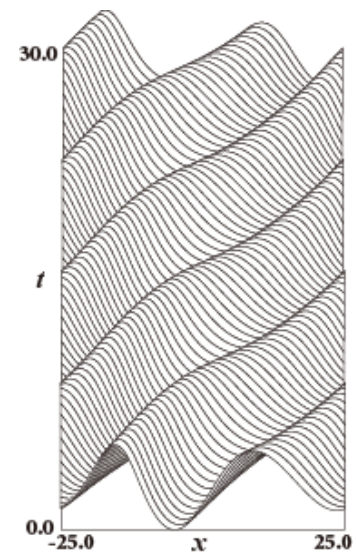
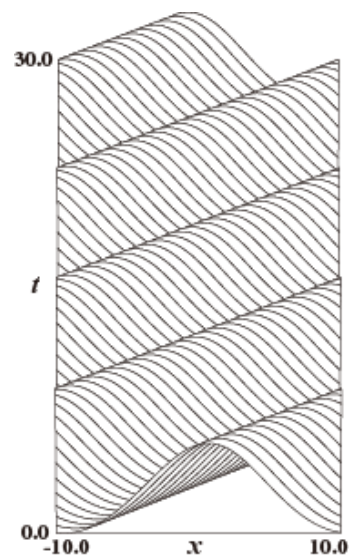
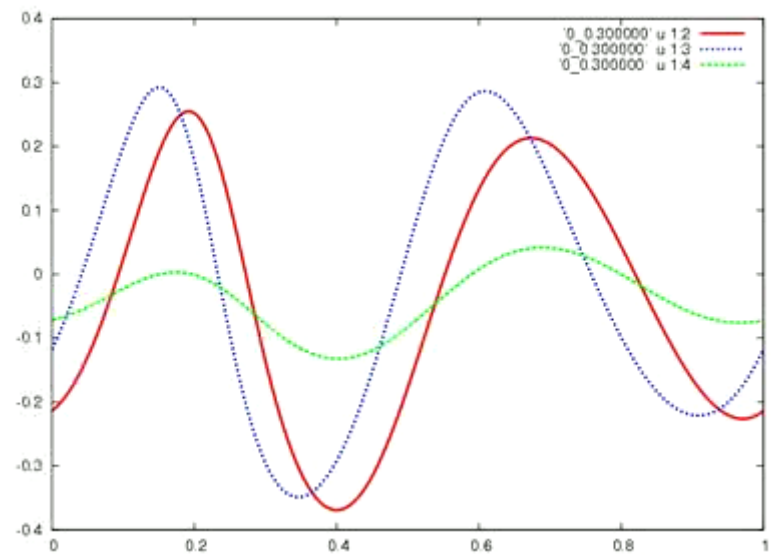


脈動進行パルス波

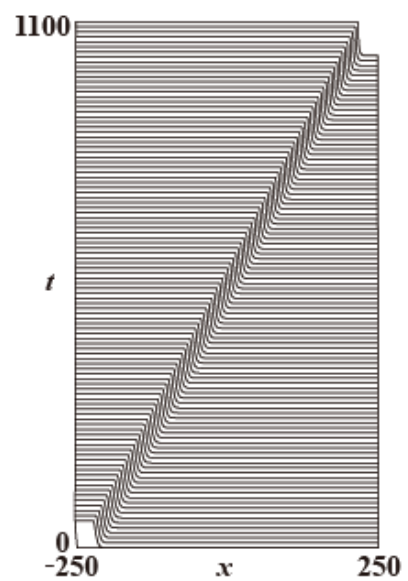
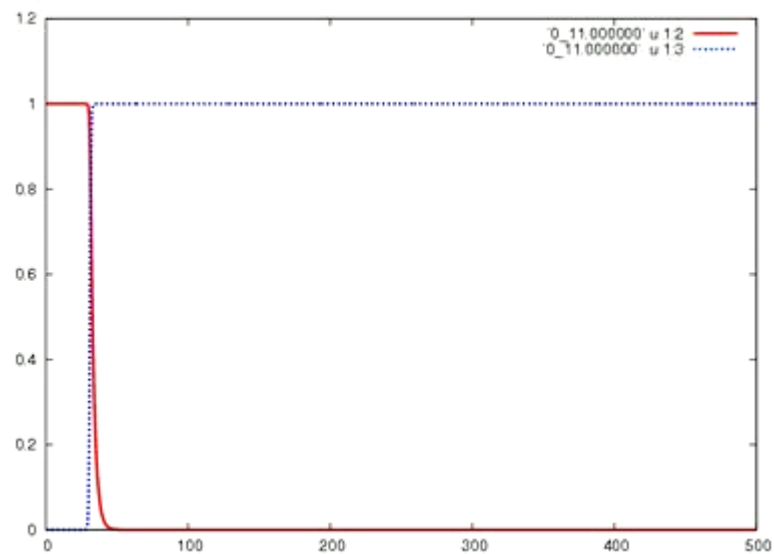
RW



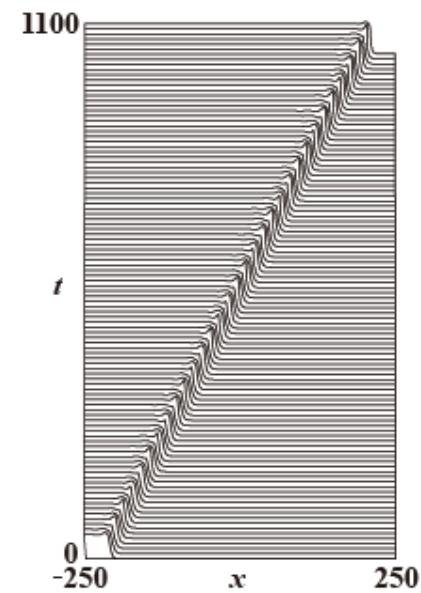
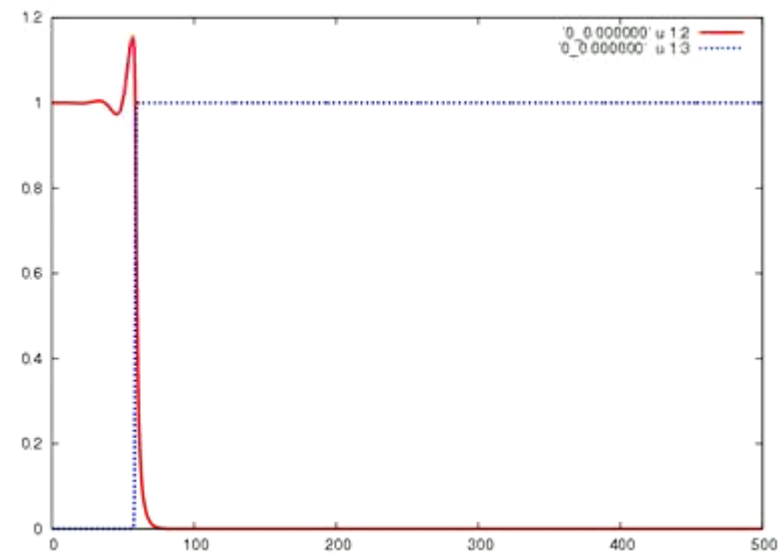
MRW



フロント波



脈動フロント波



反応拡散系に対する分岐計算に必要なこと

1. 反応拡散系に対する半陰解法の数値計算ができること
離散化（差分方程式の導出）
直接法による連立一次方程式の数値計算法（LU分解法）
2. Newton法の数値計算ができること
多変数版Newton法の数値計算法
反復法による連立一次方程式の数値計算法（ILUCGS法）
3. 固有値・固有ベクトルの数値計算
QR法
4. 分岐理論の基礎知識
坂元さんにおまかせ
5. 数値計算の魔法使いであること！？
教えることができません.

応用数学勉強会の目標

1. 分岐数値計算法の手法を理解する.
2. 1～3の数値計算ができなくても反応拡散系に対する
分岐数値計算ができるようになるRD-AUTOの使い方を理解する
(を手に入れる?!).
少なくともインストールはできるようになる.
3. RD-AUTOで何ができるかできないか理解する.
RD-AUTOでは発展方程式に対して差分法とスペクトル選点法で
数値計算することが可能である.
4. 何をすれば高速化できるか理解する.
5. RD-AUTOの開発者を見つける?!

反応拡散系の離散化

1次元拡散方程式に対する 初期値境界値問題

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad t > 0, 0 < x < L.$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad t > 0, 0 < x < L.$$

ただし, D は拡散係数である.

初期条件:
$$u(0, x) = u_0(x).$$

Dirichlet境界条件

$$u(t, 0) = \alpha, \quad u(t, L) = \beta.$$

Neumann境界条件

$$\frac{\partial}{\partial x} u(t, 0) = \alpha, \quad \frac{\partial}{\partial x} u(t, L) = \beta.$$

周期境界条件

$$u(t, 0) = u(t, L), \quad \frac{\partial u}{\partial x}(t, 0) = \frac{\partial u}{\partial x}(t, L).$$

方程式の離散化

$$\frac{\partial u}{\partial t} \rightarrow \frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \rightarrow \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

Taylor展開

$$\begin{aligned} u(y) &= u(y_0) + u_y(y_0)(y - y_0) + \frac{1}{2}u_{yy}(y_0)(y - y_0)^2 \\ &\quad + \frac{1}{6}u_{yyy}(y_0)(y - y_0)^3 + \frac{1}{24}u_{yyyy}(y_0)(y - y_0)^4 + O((y - y_0)^5). \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} y &= x + \Delta x, \quad y_0 = x \\ u(x + \Delta x) &= u(x) + u_x(x)\Delta x + \frac{1}{2}u_{xx}(x)\Delta x^2 \\ &\quad + \frac{1}{6}u_{xxx}(x)\Delta x^3 + \frac{1}{24}u_{xxxx}(x)\Delta x^4 + O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{1}$$

$$\begin{aligned} y &= x - \Delta x, \quad y_0 = x \\ u(x - \Delta x) &= u(x) - u_x(x)\Delta x + \frac{1}{2}u_{xx}(x)\Delta x^2 \\ &\quad - \frac{1}{6}u_{xxx}(x)\Delta x^3 + \frac{1}{24}u_{xxxx}(x)\Delta x^4 + O(\Delta x^5) \end{aligned} \tag{2}$$

(1) + (2) より

$$u(x + \Delta x) - u(x - \Delta x) =$$

$$2u(x) + u_{xx}(x)\Delta x^2 + \frac{1}{12}u_{xxxx}(x)\Delta x^4 + O(\Delta x^6)$$

$$\begin{aligned} u_{xx}(x) &= \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2} \\ &\quad - \frac{1}{12}u_{xxxx}(x)\Delta x^2 + O(\Delta x^4) \end{aligned}$$

$$u_{xx}(x) = \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

従って,

$$u_{xx}(x) \sim \frac{u(x + \Delta x) - 2u(x) + u(x - \Delta x)}{\Delta x^2}$$

と近似できる.

$$x_i = i\Delta x, u_i = u(x_i)$$

と表記すると

$$u_{xx}(x) \sim \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}$$

$u(t, x)$ に対して

$$t_n = n\Delta t, x_i = i\Delta x, u_i^n = u(t_n, x_i)$$

と表記すると

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = D \frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{\Delta x^2}$$

1次元2変数反応拡散系に対する 初期値・境界値問題

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v). \end{cases}$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad v(0, x) = v_0(x)$$

離散化（陰解法）

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u, v), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_v \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u, v). \end{cases}$$

$$u_i^n = u(n\Delta t, i\Delta x), \quad v_i^n = v(n\Delta t, i\Delta x)$$

$$\begin{cases} -rd_u u_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_i^{n+1} - rd_u u_{i+1}^{n+1} = u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n), \\ -rd_v v_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_v)v_i^{n+1} - rd_v v_{i+1}^{n+1} = v_i^n + \Delta t g(u_i^n, v_i^n) \end{cases}$$

差分方程式の連立 1 次方程式表示

Dirichlet条件のとき

$u_0^{n+1}, u_N^{n+1}, v_0^{n+1}, v_N^{n+1}$ の値は境界条件から決まっているので、 $i=1, \dots, N-1$ での次の方程式を解けばよい

$$\begin{cases} -rd_u u_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_i^{n+1} - rd_u u_{i+1}^{n+1} = u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n), \\ -rd_v v_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_v)v_i^{n+1} - rd_v v_{i+1}^{n+1} = v_i^n + \Delta t g(u_i^n, v_i^n) \end{cases}$$

$i=1$ のとき

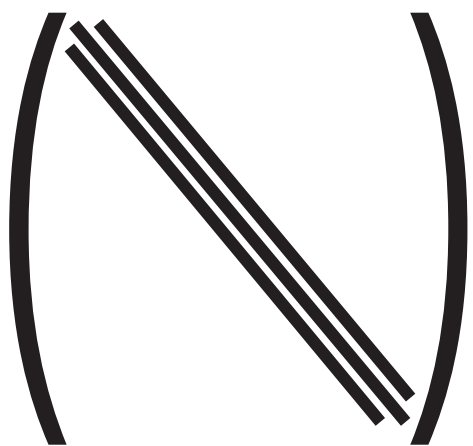
$$-rd_u a_u + (1 + 2rd_u)u_1^{n+1} - rd_u u_2^{n+1} = u_1^n + \Delta t f(u_1^n, v_1^n)$$

$i=N-1$ のとき

$$-rd_u u_{N-2}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_{N-1}^{n+1} - rd_u b_u = u_{N-1}^n + \Delta t f(u_{N-1}^n, v_{N-1}^n)$$

従って、計算すべき連立1次方程式は次のようになる：

$$\begin{pmatrix}
 1 + 2rd_u & -rd_u & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 -rd_u & 1 + 2rd_u & -rd_u & 0 & 0 & \dots & 0 \\
 0 & -rd_u & 1 + 2rd_u & -rd_u & 0 & \dots & 0 \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -rd_u & 1 + 2rd_u
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 u_1^{n+1} \\
 u_2^{n+1} \\
 \vdots \\
 u_{N-2}^{n+1} \\
 u_{N-1}^{n+1}
 \end{pmatrix}$$

$$=
 \begin{pmatrix}
 u_1^n + \Delta t f(u_1^n, v_1^n) + rd_u a_u \\
 \vdots \\
 u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n) \\
 \vdots \\
 u_{N-1}^n + \Delta t f(u_{N-1}^n, v_{N-1}^n) + rd_u b_u
 \end{pmatrix}
 .$$


行列の形

Neumann条件のとき

$i = 0, \dots, N$ に対して次の方程式を解けばよい

$$\begin{cases} -rd_u u_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_i^{n+1} - rd_u u_{i+1}^{n+1} = u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n), \\ -rd_v v_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_v)v_i^{n+1} - rd_v v_{i+1}^{n+1} = v_i^n + \Delta t g(u_i^n, v_i^n) \end{cases}$$

$i=0$ のとき

$$-rd_u(u_1^{n+1} - 2\Delta x a_u) + (1 + 2rd_u)u_0^{n+1} - rd_u u_1^{n+1} = u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n)$$

$\Longleftrightarrow$

$$(1 + 2rd_u)u_0^{n+1} - 2rd_u u_1^{n+1} = u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n) - 2rd_u \Delta x a_u$$

$i=N$ のとき

$$-rd_u u_{N-1}^n + (1 + 2rd_u)u_N^{n+1} - rd_u(u_{N-1}^n + 2\Delta x b_u) = u_N^n + \Delta t f(u_N^n, v_N^n)$$

$\Longleftrightarrow$

$$-2rd_u u_{N-1}^n + (1 + 2rd_u)u_N^{n+1} = u_N^n + \Delta t f(u_N^n, v_N^n) + 2rd_u \Delta x b_u$$

従って、計算すべき連立1次方程式は次のようになる：

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+2rd_u) & -rd_u & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -rd_u & 1+2rd_u & -rd_u & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -rd_u & 1+2rd_u & -rd_u \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -rd_u & \frac{1}{2}(1+2rd_u) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_0^{n+1} \\ u_1^{n+1} \\ \vdots \\ u_{N-1}^{n+1} \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix} \\
 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n) - 2rd_u \Delta x a_u) \\ \vdots \\ u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n) \\ \vdots \\ \frac{1}{2}(u_N^n + \Delta t f(u_N^n, v_N^n) + 2rd_u \Delta x b_u) \end{pmatrix} .$$


周期境界条件のとき

$i = 0, \dots, N-1$ に対して次の方程式を解けばよい

$$\begin{cases} -rd_u u_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_i^{n+1} - rd_u u_{i+1}^{n+1} = u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n), \\ -rd_v v_{i-1}^{n+1} + (1 + 2rd_v)v_i^{n+1} - rd_v v_{i+1}^{n+1} = v_i^n + \Delta t g(u_i^n, v_i^n) \end{cases}$$

$i = 0$ のとき

$$-rd_u u_{N-1}^{n+1} + (1 + 2rd_u)u_0^{n+1} - rd_u u_1^{n+1} = u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n)$$

$\Longleftrightarrow$

$$(1 + 2rd_u)u_0^{n+1} - rd_u u_1^{n+1} - rd_u u_{N-1}^{n+1} = u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n)$$

$i = N-1$ のとき

$$-rd_u u_{N-2}^n + (1 + 2rd_u)u_{N-1}^{n+1} - rd_u u_1^n = u_{N-1}^n + \Delta t f(u_{N-1}^n, v_{N-1}^n)$$

$\Longleftrightarrow$

$$-rd_u u_1^n - rd_u u_{N-2}^n + (1 + 2rd_u)u_{N-1}^{n+1} = u_{N-1}^n + \Delta t f(u_{N-1}^n, v_{N-1}^n)$$

従って、計算すべき連立1次方程式は次のようになる.

$$\begin{pmatrix}
 1 + 2rd_u & -rd_u & 0 & 0 & \cdots & 0 & -rd_u \\
 -rd_u & 1 + 2rd_u & -rd_u & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & -rd_u & 1 + 2rd_u & -rd_u \\
 -rd_u & 0 & \cdots & 0 & 0 & -rd_u & 1 + 2rd_u
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 u_0^{n+1} \\
 u_1^{n+1} \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 u_{N-2}^{n+1} \\
 u_{N-1}^{n+1}
 \end{pmatrix}$$

$$=
 \begin{pmatrix}
 u_0^n + \Delta t f(u_0^n, v_0^n) \\
 \vdots \\
 u_i^n + \Delta t f(u_i^n, v_i^n) \\
 \vdots \\
 \vdots \\
 u_{N-1}^n + \Delta t f(u_{N-1}^n, v_{N-1}^n)
 \end{pmatrix}
 \cdot
 \begin{pmatrix}
 \diagup \\
 \diagdown
 \end{pmatrix}$$

発展方程式が計算できるようになったら…

定常解の数値計算

反応拡散方程式に対する定常問題

$$0 = Du_{xx} + F(u; \lambda), \quad x \in I,$$

+ boundary condition.

離散化を行う:

$$\mathbf{U} = (u_0, u_1, \dots, u_{N-1}, u_N)$$

$$\mathbf{F} = (f(u_0; \lambda), f(u_1; \lambda), \dots, f(u_{N-1}; \lambda), f(u_N, \lambda))$$

$$H_i(\mathbf{U}; \lambda) = Dr u_{i-1} - 2Dr u_i + Dr u_{i+1} + f(u_i; \lambda)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}; \lambda) = (H_0(\mathbf{U}; \lambda), H_1(\mathbf{U}; \lambda), \dots, H_{N-1}(\mathbf{U}; \lambda), H_N(\mathbf{U}; \lambda))$$

$$\text{ただし, } r = \frac{1}{\Delta x}$$

反応拡散方程式に対する定常問題

境界条件の離散化

Dirichlet境界条件 ($1 \leq i \leq N-1$)

$$u_0 = \alpha, \quad u_N = \beta$$

Neumann境界条件 ($0 \leq i \leq N$)

$$u_1 - u_{-1} = 2\Delta x \alpha, \quad u_{N+1} - u_{N-1} = 2\Delta x \beta$$

周期境界条件 ($0 \leq i \leq N-1$)

$$u_0 = u_N, \quad u_{-1} = u_{N-1}$$

反応拡散系に対する定常問題

問題

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}; \lambda) := D\mathbf{U} + \mathbf{F}(\mathbf{U}; \lambda) = \mathbf{0}$$

となる $\mathbf{U}(x; \lambda)$ を見つけなさい.

多変数Newton法

$$\mathbf{U}^k = \mathbf{U}^{k-1} - \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}^{k-1}; \lambda) \right)^{-1} \mathbf{H}(\mathbf{U}^{k-1}; \lambda)$$

を用いて求める. ただし,

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}; \lambda) = \left(\frac{\partial H_i}{\partial u_j}(\mathbf{U}; \lambda) \right)_{0 \leq i, j \leq N}$$

数値計算

連立一次方程式

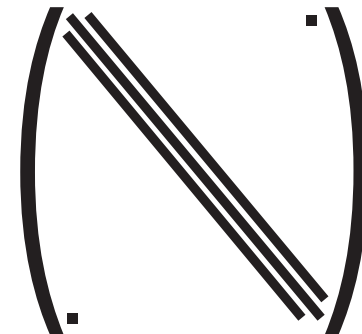
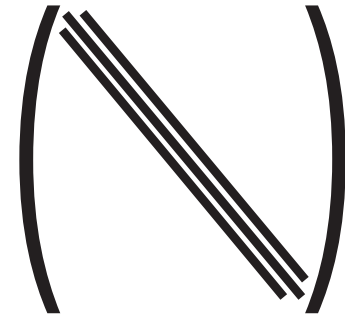
$$\left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}} (\mathbf{U}^{k-1}; \lambda) \right) \mathbf{x} = \mathbf{H}(\mathbf{U}^{k-1}; \lambda)$$

の数値計算が大部分を占めている.

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_{i-1}}(\mathbf{U}^k; \lambda) = Dr$$

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_i}(\mathbf{U}^k; \lambda) = -2Dr + \frac{\partial f}{\partial u_i}(u_i^k; \lambda)$$

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_{i+1}}(\mathbf{U}^k; \lambda) = Dr$$



定常解の線形化安定性解析（固有値問題）

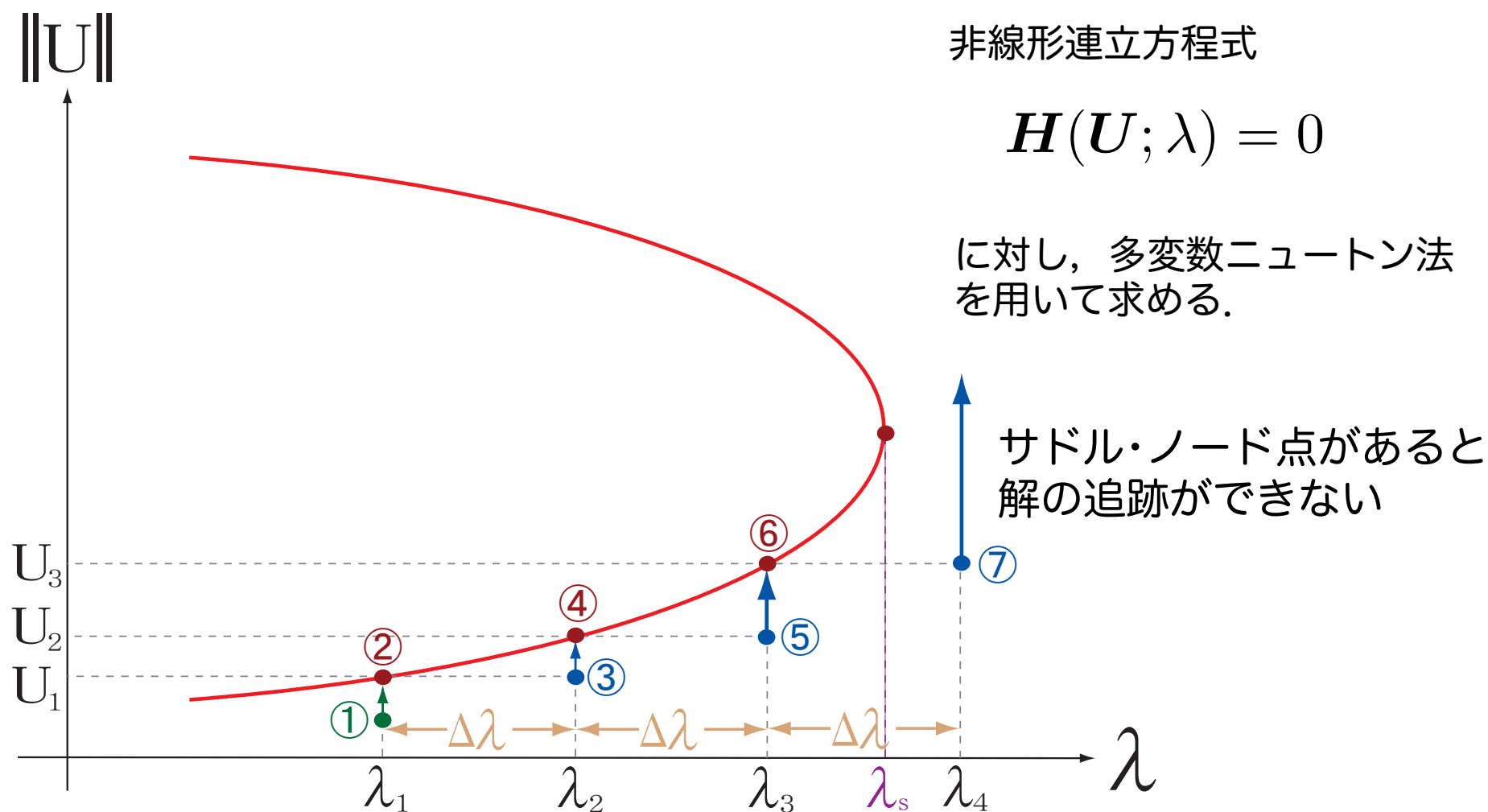
$$\lambda u = \left(D \frac{d^2}{dx^2} + \frac{df}{du}(v; \lambda) \right) u$$

このとき線形化作用素の離散化を行うと

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}}(\mathbf{U}; \lambda) = \left(\frac{\partial H_i}{\partial u_j}(\mathbf{U}; \lambda) \right)_{0 \leq i, j \leq N}$$

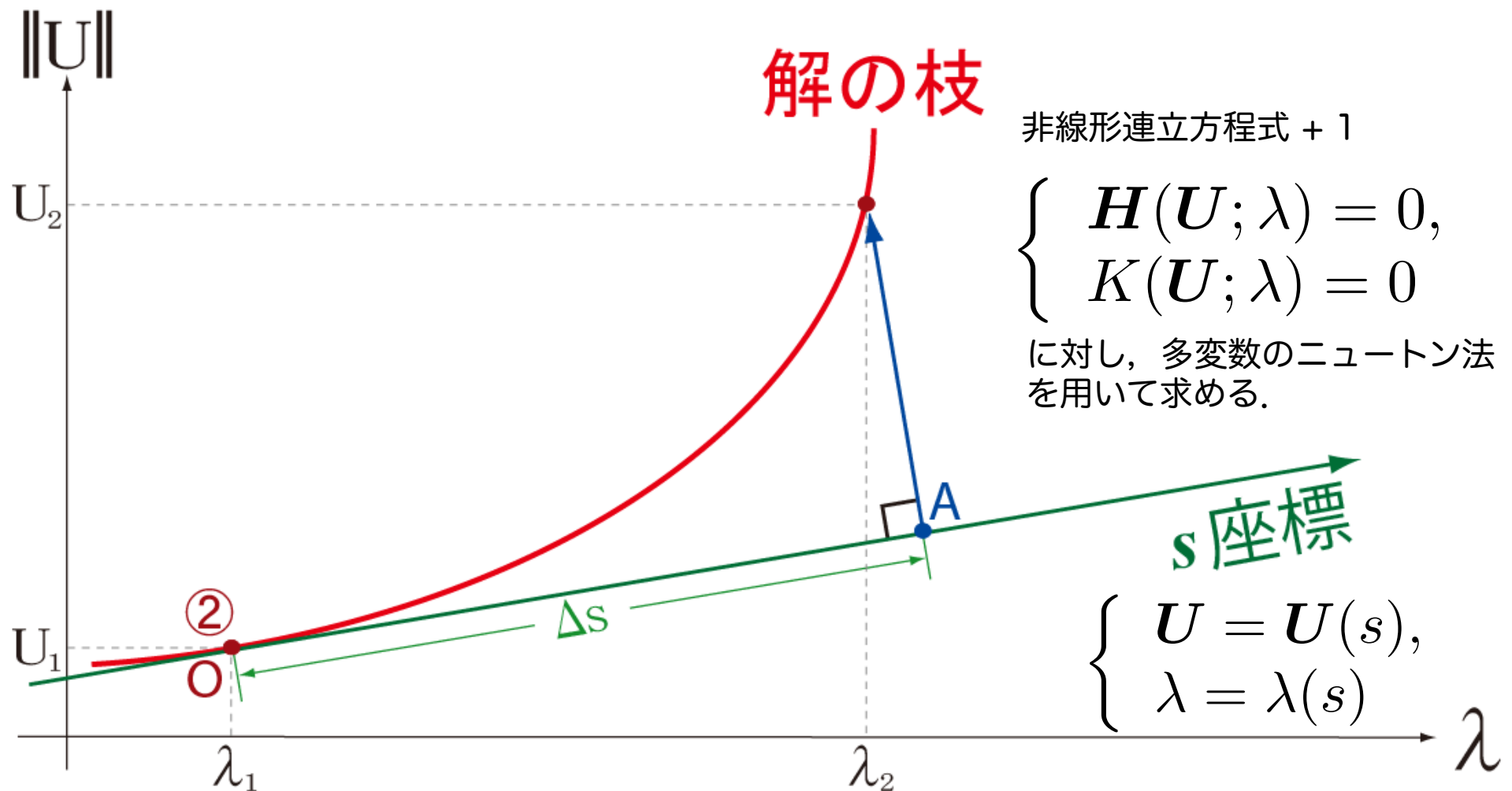
が出てくる．これはNewton法で計算する行列と同じ．

解の枝を追跡



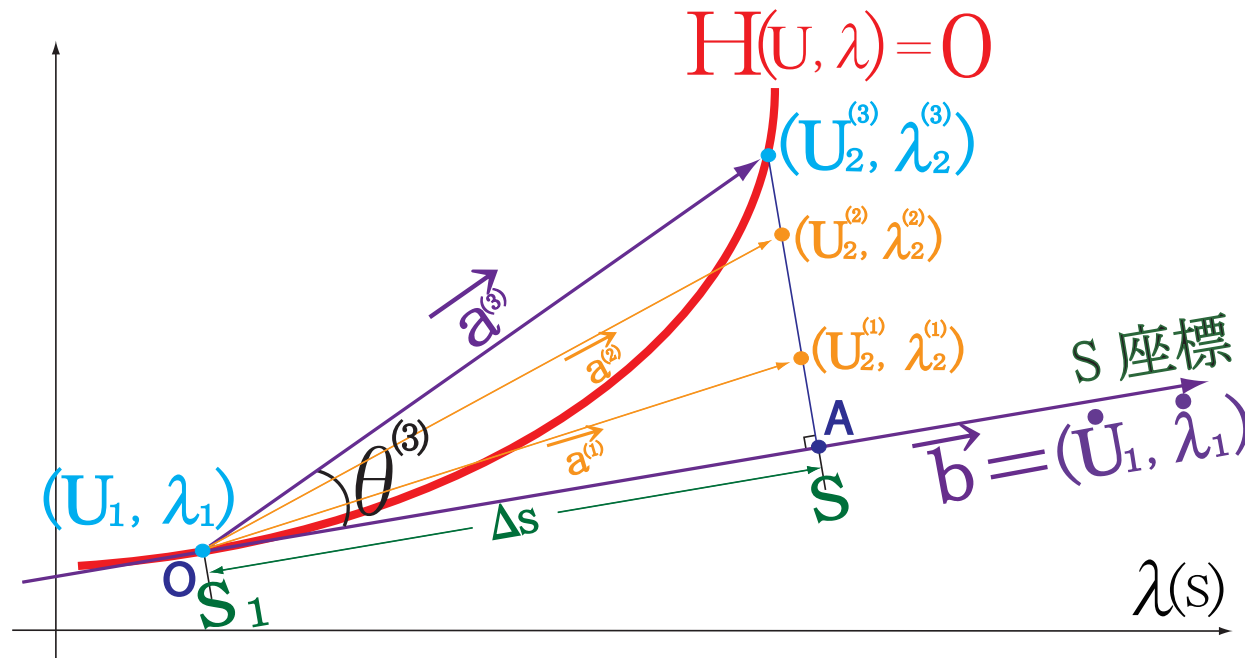
- ① 時間発展方程式から求まる解
- ② ニュートン法で解を収束 (λ_1, U_1)
- ③ ②の解 ($\lambda_1 + \Delta\lambda, U_1$) を初期値としてニュートン法を適用

疑似弧長法 (Kellerの方法)



- ① 解 (λ_1, U_1) は求まっているとする
- ② 点Oでの接線を考え、点Oから Δs だけ離れた点をAとする
- ③ 点Aから接線方向に垂直な方向へ進むように解を収束させる

Keller方程式 の導出



非線形連立方程式+1

$$\begin{cases} H(U; \lambda) = 0, \\ K(U; \lambda) = 0 \end{cases}$$

に対し，多変数ニュートン法を用いて求める．

$(U_2, c_2, \lambda_2) = (U_2(s), c_2(s), \lambda_2(s))$ と考える．

方向ベクトル $\vec{b} = (\dot{U}_1, \dot{c}, \dot{\lambda}_1)$ は求まっているとする．

ただし， $\cdot$ は $\frac{d}{ds}$ で $\|\vec{b}\| = 1$ とする．

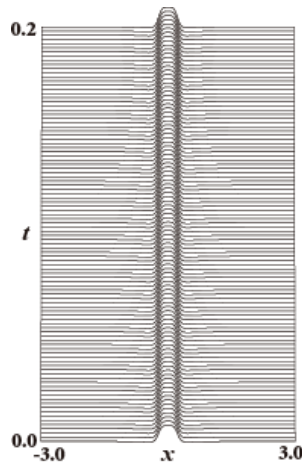
$$\vec{a}^{(n)} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}^{(n)}\| \|\vec{b}\| \cos(\theta^{(n)})$$

$$K(U; \lambda) \equiv (U_2^k - U_1) \cdot \dot{U}_1 + (\lambda_2^k - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - \Delta s = 0$$

Keller's Equation

反応拡散系のパルス波 (1)

① 定常パルス波 $0 = DU_{xx} + F(U)$



n 変数反応拡散系

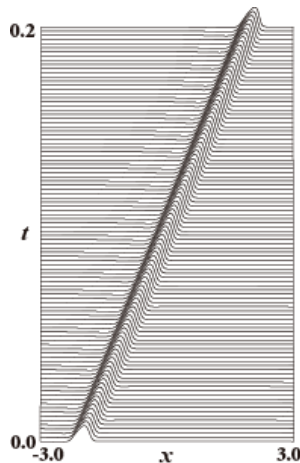
$$u_t = Du_{xx} + F(u), \quad t > 0, \quad x \in \mathbf{R}.$$

$$u(t, x) = (u_1(t, x), u_2(t, x), \dots, u_n(t, x)) : \mathbf{R}_+ \times \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}^n,$$

$$F(u) = (F_1(u), F_2(u), \dots, F_n(u)) : \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n,$$

$$D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n), \quad d_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq n$$

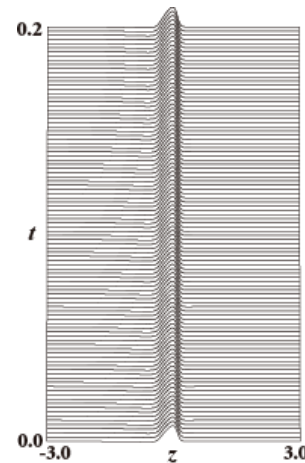
② 進行パルス波 $0 = DU_{zz} + cU_z + F(U)$



$$z = x - ct$$



c は速度

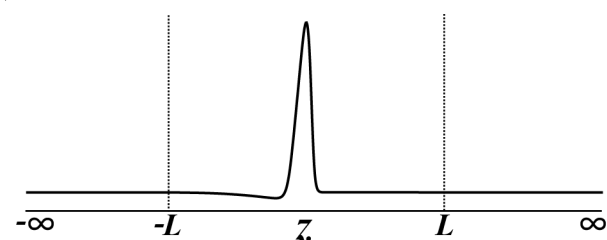


進行パルス波の数値計算法

$$(*) \begin{cases} H(U, c) \equiv DU_{zz} + cU_z + F(U) = 0, & z \in [-L, L), \\ U(-L) = U(L), \quad U_z(-L) = U_z(L) \end{cases}$$

の解 (U, c) (c は速度) を数値的に求める

(*) を離散化して差分方程式を作る.

n 変数の反応拡散系に対し空間を N 分割する場合 

nN 次元連立 1 次方程式 $(H(u, c) = 0, \quad u \equiv (u_1, \dots, u_{nN}))$

未知数: $nN + 1$ 個 (u_i ($1 \leq i \leq nN$), c)

方程式の数: nN 個

(u, c) を求めるために方程式を 1 つ加える.

空間方向の位相条件 (Phase Condition)

$(nN+1)$ 次元非線形連立方程式

$$\begin{cases} H(u, c) = 0, \\ P(u, c) = 0 \end{cases}$$

に対し, 多変数のニュートン法を用いて求める.

$$\begin{cases} H(\mathbf{u}, c) = D \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} + c \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} + F(\mathbf{u}) = 0, \\ P(\mathbf{u}, c) = 0 \end{cases}$$

GIVEN : $(u^{(0)}, c^{(0)})$ ← 初期値として例えば時間発展方程式から求まる進行パルス波を選ぶ

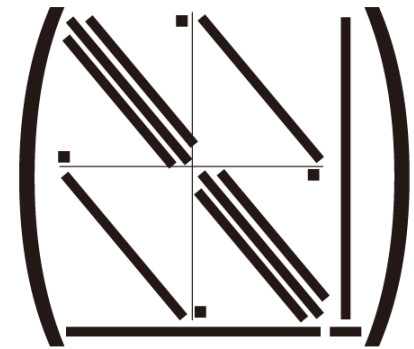
WHILE(NOT CONVERGED)

$$\left\{ \begin{array}{l} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) & \frac{\partial H}{\partial c}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) & \frac{\partial P}{\partial c}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^{(k)} \\ \Delta c^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \\ P(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \end{pmatrix} \\ (\mathbf{u}^{(k+1)}, c^{(k+1)}) = (\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) - (\Delta \mathbf{u}^{(k)}, \Delta c^{(k)}) \end{array} \right\} \text{ニュートン法}$$

LU分解法で解くと時間がかかる



1 変数の場合



2 変数の場合

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) & \frac{\partial H}{\partial c}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) & \frac{\partial P}{\partial c}(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^{(k)} \\ \Delta c^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \\ P(\mathbf{u}^{(k)}, c^{(k)}) \end{pmatrix}$$

STEP1 第1式の計算

$$\Delta \mathbf{u} = \underbrace{\left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right)^{-1} \mathbf{H}}_{\equiv \Delta \tilde{\mathbf{u}}} - \underbrace{\left(\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \right)^{-1} \frac{\partial H}{\partial c}}_{\equiv \Delta \tilde{c}} \Delta c \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \Delta \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{H}, \\ \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} \Delta \tilde{c} = \frac{\partial H}{\partial c} \end{array} \right.$$

ILUCGSで計算

STEP2 第2式の計算

$$\left(\frac{\partial P}{\partial c} - \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} \Delta \tilde{c} \right) \Delta c = P - \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} \Delta \tilde{\mathbf{u}}$$

実行結果 (例)

1次元, 2変数, 空間分割数5000

①LU分解 20分

②ILUCGS 10秒

2次元にも応用可能

STEP3 解の更新

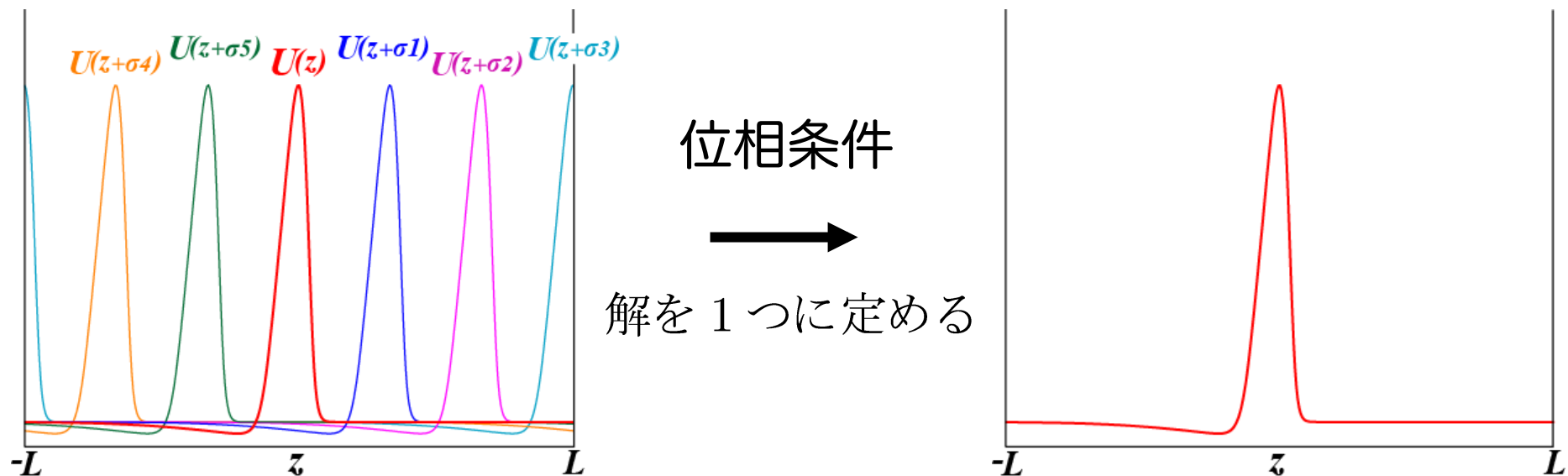
$$\begin{cases} \mathbf{u}^{(k+1)} = \mathbf{u}^{(k)} - \Delta \tilde{\mathbf{u}}^{(k)} + \Delta \tilde{c}^{(k)} \Delta c^{(k)} \\ c^{(k+1)} = c^{(k)} - \Delta c^{(k)} \end{cases}$$

空間方向の位相条件 (Phase Condition)

パルス波は空間平行移動に対して自由度をもつ.

すなわち, $U(z)$ が (*) の解 $\Rightarrow U(z + \forall \sigma)$ も (*) の解.

空間平行移動の任意性をなくし解を1つに定める方法を位相条件と呼ぶ.



位相条件の与え方の例

空間上のある位置 $z = \hat{z}$ において
解の値を $U(\hat{z}) = \hat{U}$ で固定する

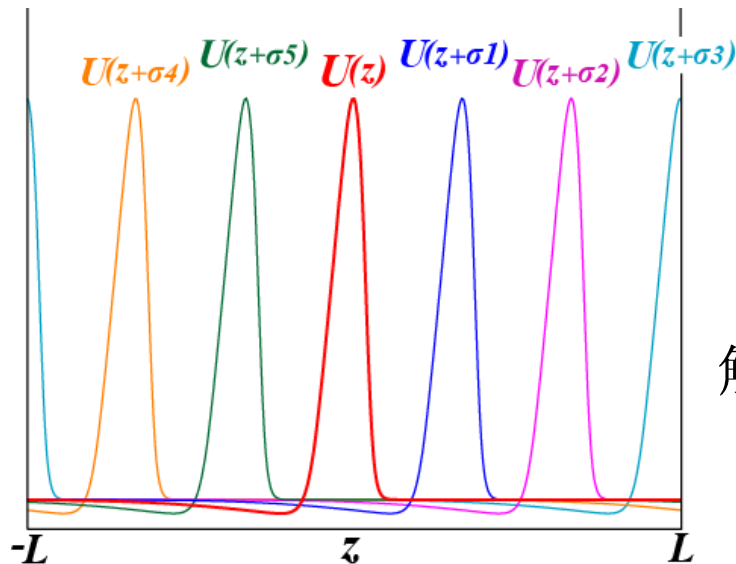
離散化 ↓

$$P(u, c) \equiv u_i - \hat{u} = 0$$

$\hat{z}$: パルスのテール部分

$\hat{U}$: 最大値と最小値の

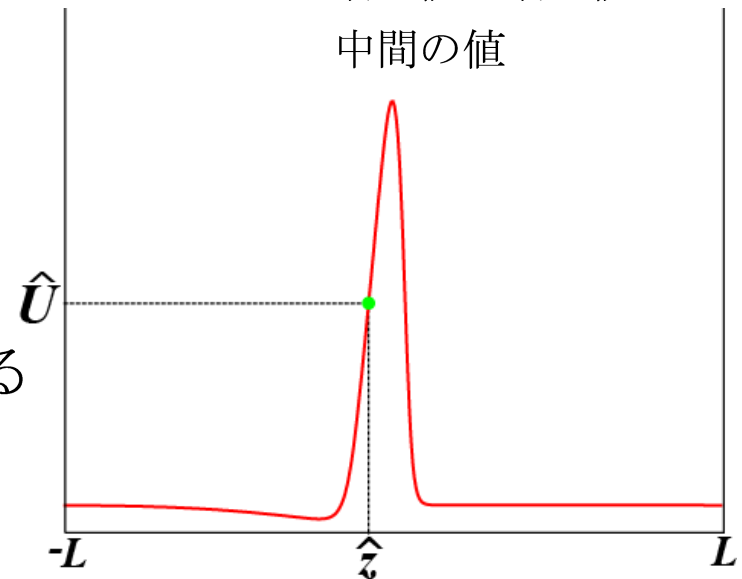
中間の値



位相条件



解を 1 つに定める



例2 位相条件の与え方

状況設定

あるパラメータ $\lambda = \lambda_1$ に対して解 $\bar{U}(z; \lambda_1)$ が求まっている。
 $\lambda = \lambda_2 (= \lambda_1 + \Delta\lambda)$ での解 $U(z; \lambda_2)$ を求めるために位相条件を考える。

位相条件

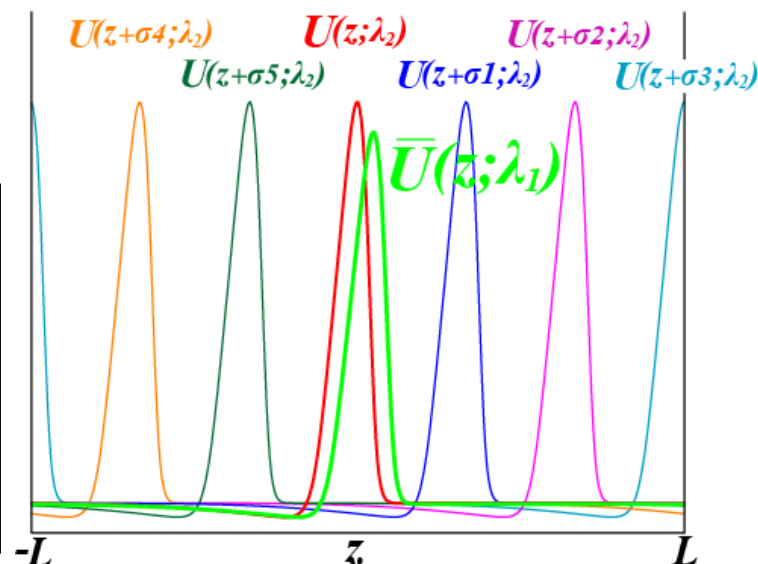
任意の σ に対して、 $U(z + \sigma; \lambda_2)$ と $\bar{U}(z; \lambda_1)$ の距離が最小となるような条件を与える。

すなわち

$$M(\sigma) \equiv \int_{-L}^L \|U(z + \sigma) - \bar{U}(z)\|^2 dz$$

に対して $M(\sigma)$ が最小になるように σ を選ぶ。

ただし、 $\|U\| = \sqrt{(U, U)}$ である。



$M(\sigma)$ を最小にするための条件は $\frac{dM}{d\sigma}(\sigma) = 0$ である. 従って,

$$(*1) \int_{-L}^L (\mathbf{U}(z + \sigma) - \bar{\mathbf{U}}(z)) \cdot \mathbf{U}'(z + \sigma) dz = 0$$

を得る. ここで $'$ は $\frac{d}{dz}$ を表す.

(*1) は任意の σ に対して成り立つので $\sigma = 0$ とおく. すなわち,

$$(*2) \int_{-L}^L (\mathbf{U}(z) - \bar{\mathbf{U}}(z)) \cdot \mathbf{U}'(z) dz = 0$$
$$\int_{-L}^L \mathbf{U}(z) \cdot \mathbf{U}'(z) dz - \int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}(z) \cdot \mathbf{U}'(z) dz = 0$$

ここで, 周期境界条件 $\mathbf{U}(-L) = \mathbf{U}(L)$ より

$$\int_{-L}^L \mathbf{U}(z) \cdot \mathbf{U}'(z) dz = \frac{1}{2} [\mathbf{U}(z)^2]_{-L}^L = 0$$

となるので (*2) は $\int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}(z) \cdot \mathbf{U}'(z) dz = 0$ となる.

さらに, 部分積分を行い, 周期境界条件を用いると

$$\int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}'(z) \cdot \mathbf{U}(z) dz = 0 \quad \leftarrow \text{位相条件}$$

となる.

例3 フロント波の位相条件の与え方

$$M(\sigma) \equiv \int_{-L}^L \| \mathbf{U}(z + \sigma) - \bar{\mathbf{U}}(z) \|^2 dz$$

に対して $M(\sigma)$ が最小になるように σ を選ぶ

$$\int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}'(z) \cdot \mathbf{U}(z) dz = 0$$

パルス波

フロント波

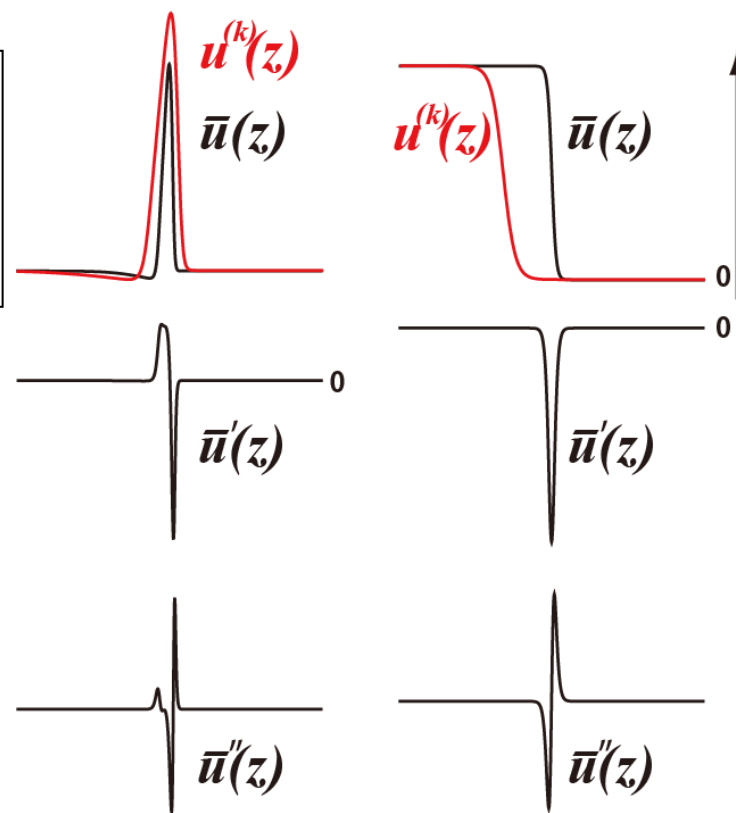
$$M(\sigma) \equiv \int_{-L}^L \| \mathbf{U}'(z + \sigma) - \bar{\mathbf{U}}'(z) \|^2 dz$$

に対して $M(\sigma)$ が最小になるように σ を選ぶ

$$\int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}''(z) \cdot \mathbf{U}'(z) dz = 0$$

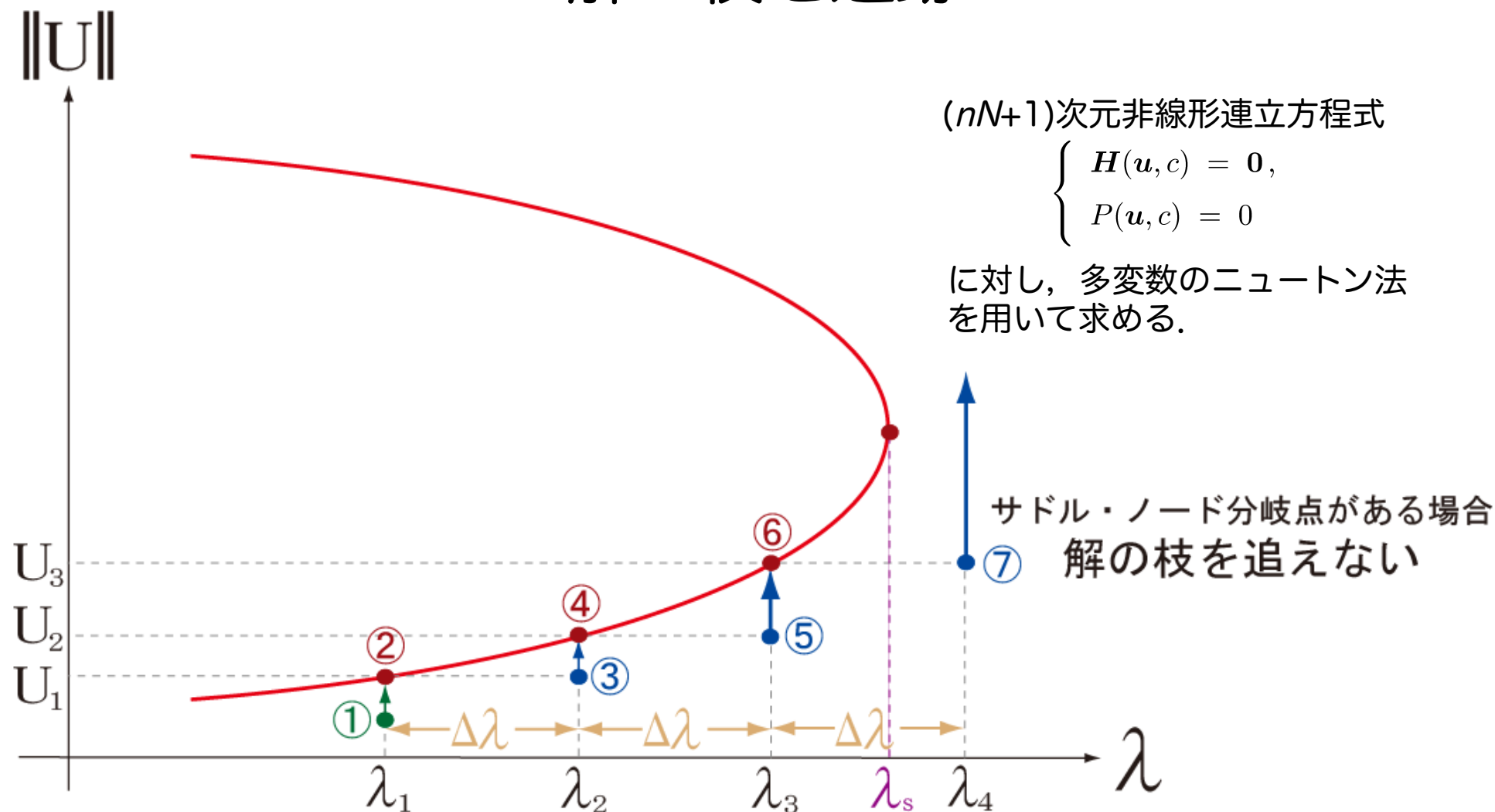
最終的な
位相条件

$$\int_{-L}^L (\bar{c}\bar{\mathbf{U}}(z) + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}})) \cdot \mathbf{U}(z)' dz = 0$$



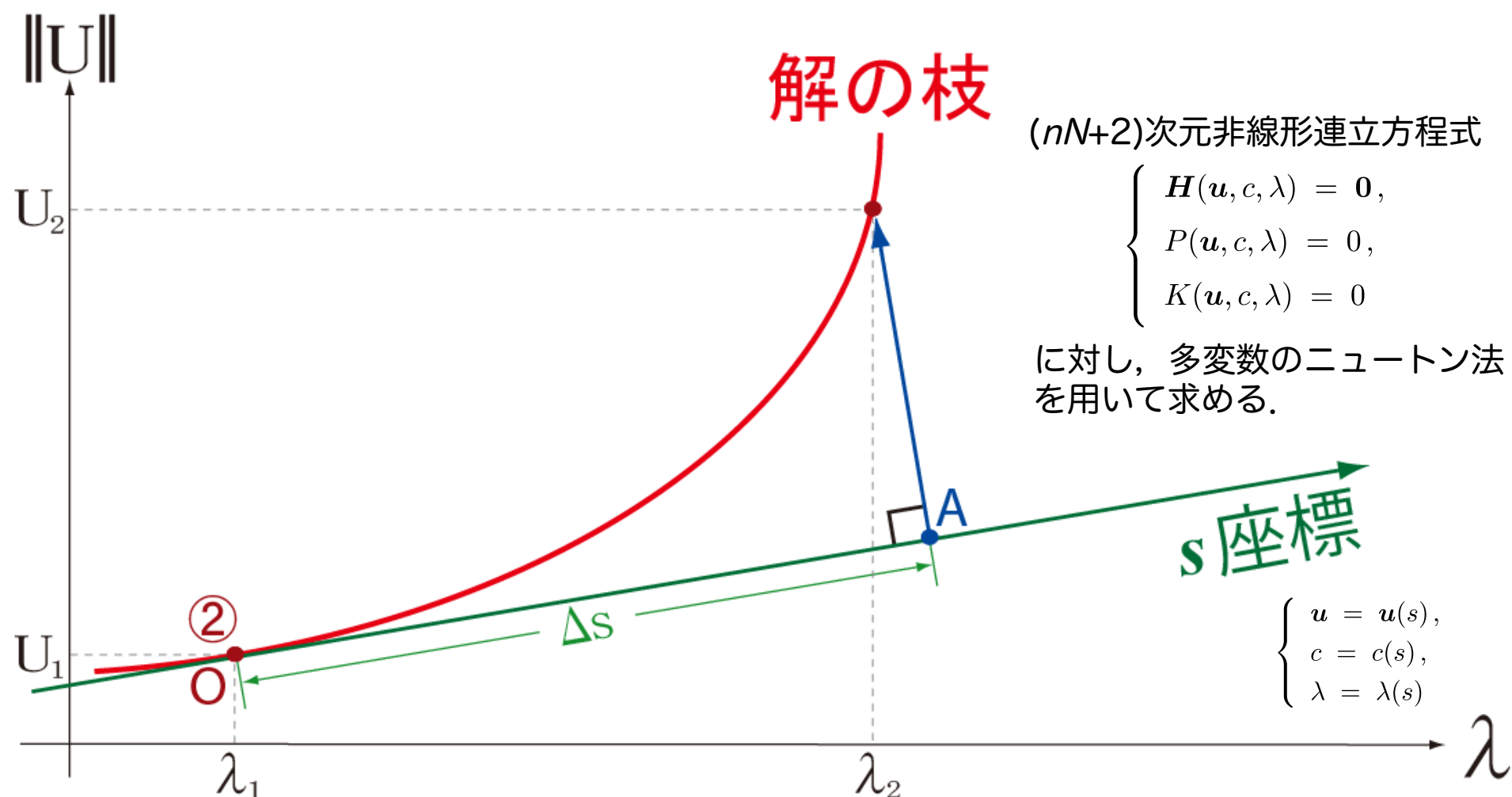
黒 ... $\lambda = \lambda_1$ に対する既に求まってる解
赤 ... $\lambda = \lambda_2$ に対する今から求める解

解の枝を追跡



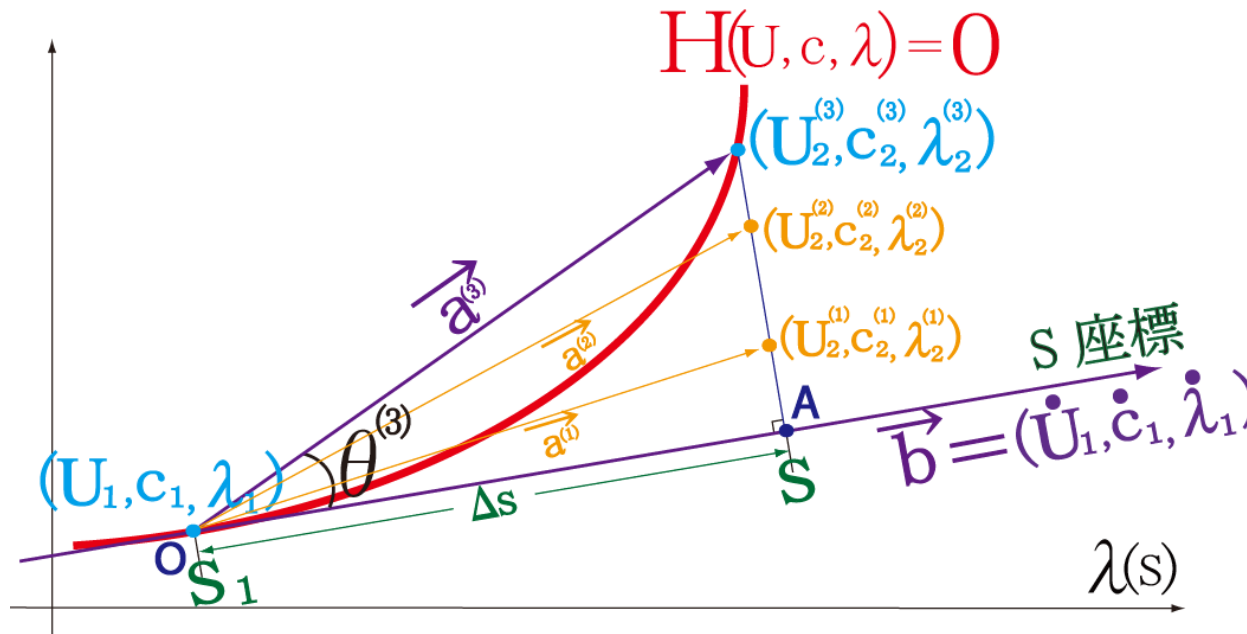
- ① 時間発展方程式から求まる解
- ② ニュートン法で解を収束 (λ_1, U_1)
- ③ ②の解 ($\lambda_1 + \Delta\lambda, U_1$) を初期値としてニュートン法を適用

疑似弧長法 (Kellerの方法)



- ① 解 (λ_1, U_1) は求まっているとする
- ② 点Oでの接線を考え, 点Oから Δs だけ離れた点をAとする
- ③ 点Aから接線方向に垂直な方向へ進むように解を収束させる

Keller方程式 の導出



$(nN+2)$ 次元非線形連立方程式

$$\begin{cases} H(\mathbf{u}, c, \lambda) = 0, \\ P(\mathbf{u}, c, \lambda) = 0, \\ K(\mathbf{u}, c, \lambda) = 0 \end{cases}$$

に対し，多変数のニュートン法を用いて求める．

$(U_2, c_2, \lambda_2) = (U_2(s), c_2(s), \lambda_2(s))$ と考える．

方向ベクトル $\vec{b} = (\dot{U}_1, \dot{c}_1, \dot{\lambda}_1)$ は求まっているとする．

ただし， $\cdot$ は $\frac{d}{ds}$ で $\|\vec{b}\| = 1$ とする．

$$\vec{a}^{(n)} \cdot \vec{b} = \|\vec{a}^{(n)}\| \|\vec{b}\| \cos(\theta^{(n)})$$

$$(U_2^{(n)} - U_1) \cdot \dot{U}_1 + (c_2^{(n)} - c_1) \dot{c}_1 + (\lambda_2^{(n)} - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - \Delta s = 0$$

Keller's Equation

$$\begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{u}, c, \lambda) = \mathbf{0}, \\ P(\mathbf{u}, c, \lambda) = 0, \\ K(\mathbf{u}, c, \lambda) = (\mathbf{U}_2 - \mathbf{U}_1) \cdot \dot{\mathbf{U}}_1 + (c_2 - c_1) \dot{c}_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - \Delta s = 0 \end{cases}$$



sで微分

方向ベクトルの導出

$$\begin{cases} D\mathbf{H}(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{\mathbf{U}}_2 + \mathbf{H}_c(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{c}_2 + \mathbf{H}_\lambda(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{\lambda}_2 = \mathbf{0}, \\ P_{\mathbf{U}}(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{\mathbf{U}}_2 + P_c(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{c}_2 + P_\lambda(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2) \dot{\lambda}_2 = 0, \\ \dot{\mathbf{U}}_1 \dot{\mathbf{U}}_2 + \dot{c}_1 \dot{c}_2 + \dot{\lambda}_1 \dot{\lambda}_2 = 1 \end{cases}$$

初期方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}_0, \dot{c}_0, \dot{\lambda}_0)$ の与え方の例

2つの初期解 $(\mathbf{U}_{01}, c_{01}, \lambda_{01}), (\mathbf{U}_{02}, c_{02}, \lambda_{02})$ を用意する

$$\tilde{\dot{\mathbf{U}}}_0 \equiv \frac{\mathbf{U}_{02} - \mathbf{U}_{01}}{\lambda_{02} - \lambda_{01}}, \quad \tilde{\dot{c}}_0 \equiv \frac{c_{02} - c_{01}}{\lambda_{02} - \lambda_{01}}, \quad \tilde{\dot{\lambda}}_0 \equiv \frac{\lambda_{02} - \lambda_{01}}{\lambda_{02} - \lambda_{01}} = 1$$

方向ベクトルの正規化

$$\dot{\mathbf{U}}_0 \approx \frac{\tilde{\dot{\mathbf{U}}}_0}{\|(\tilde{\dot{\mathbf{U}}}_0, \tilde{\dot{c}}_0, \tilde{\dot{\lambda}}_0)\|}, \quad \dot{c}_0 \approx \frac{\tilde{\dot{c}}_0}{\|(\tilde{\dot{\mathbf{U}}}_0, \tilde{\dot{c}}_0, \tilde{\dot{\lambda}}_0)\|}, \quad \dot{\lambda}_0 \approx \frac{\tilde{\dot{\lambda}}_0}{\|(\tilde{\dot{\mathbf{U}}}_0, \tilde{\dot{c}}_0, \tilde{\dot{\lambda}}_0)\|}$$

Keller方程式付きニュートン法

2つの初期解 $(\mathbf{U}_1, c_1, \lambda_1)$, $(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2)$ を用意

初期方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の計算

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{U}} = \frac{\mathbf{U}_2 - \mathbf{U}_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \\ \dot{c} = \frac{c_2 - c_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \quad \dot{\lambda} = 1 \end{cases}$$

方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の正規化

ニュートン法のヤコビ行列と右辺の計算

LU分解

解の計算

解の更新

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial H}{\partial c} & \frac{\partial H}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P \\ K \end{pmatrix}$$

$$(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{c}, \tilde{\lambda}) = (\mathbf{u}, c, \lambda) - (\Delta \mathbf{u}, \Delta c, \Delta \lambda)$$

解の収束判定

収束してない

収束してる

方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の計算

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial H}{\partial c} & \frac{\partial H}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}} \\ \dot{c} \\ \dot{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

ニュートン法と擬似ニュートン法

2つの初期解 $(\mathbf{U}_1, c_1, \lambda_1)$, $(\mathbf{U}_2, c_2, \lambda_2)$ を用意

初期方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の計算

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{U}} = \frac{\mathbf{U}_2 - \mathbf{U}_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \\ \dot{c} = \frac{c_2 - c_1}{\lambda_2 - \lambda_1}, \quad \dot{\lambda} = 1 \end{cases}$$

方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の正規化

ニュートン法のヤコビ行列と右辺の計算

LU分解

右辺のみ計算

解の計算

解の更新

解の収束判定

収束してない

収束してる

方向ベクトル $(\dot{\mathbf{U}}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ の計算

NORM > M

NORM ≤ M

ニュートン法か擬似
ニュートン法を選択条件

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial H}{\partial c} & \frac{\partial H}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P \\ K \end{pmatrix}$$

$$(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{c}, \tilde{\lambda}) = (\mathbf{u}, c, \lambda) - (\Delta \mathbf{u}, \Delta c, \Delta \lambda)$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial H}{\partial c} & \frac{\partial H}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}} \\ \dot{c} \\ \dot{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

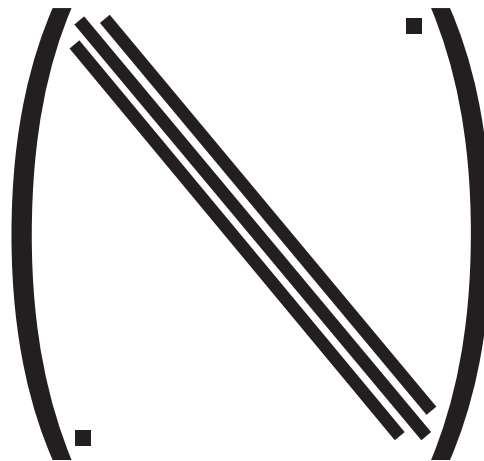
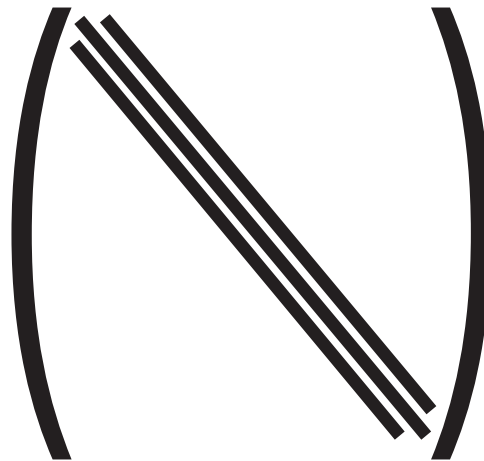
定常解の安定性

このような形の
行列に対する
固有値を計算すればよい

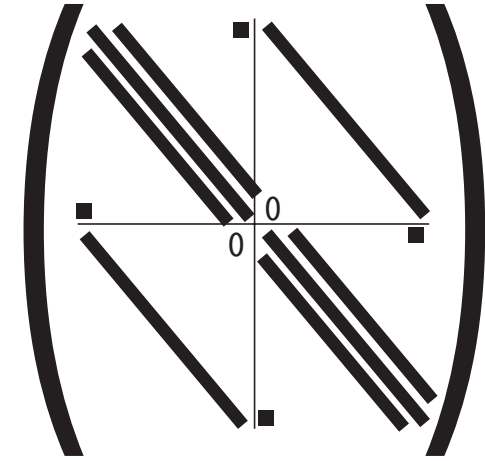
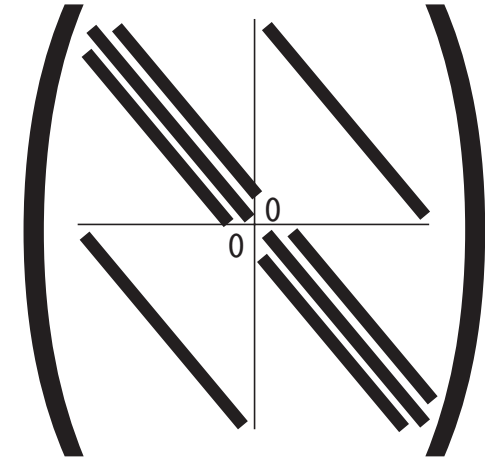
Dirichlet境界条件
Neumann境界条件

周期境界条件

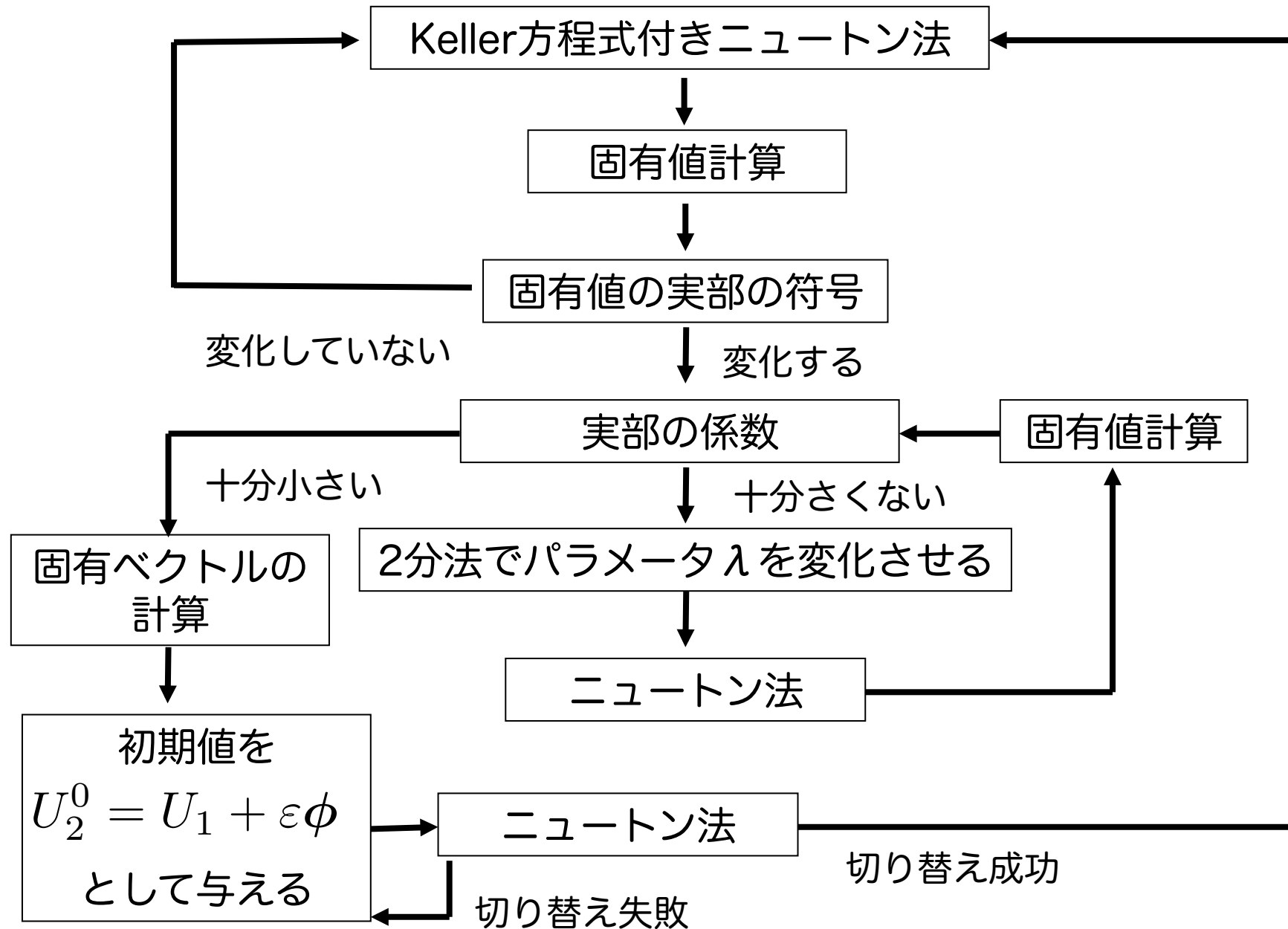
1変数



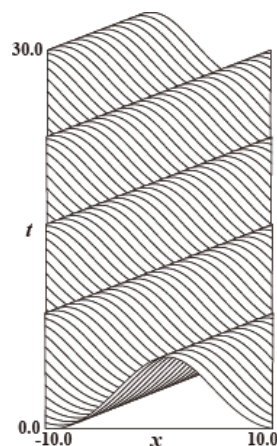
2変数



分岐点の近似と新しいブランチへのスイッチ

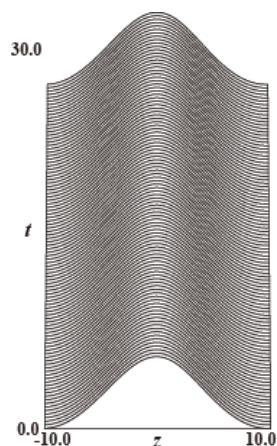


RWとフロント波の数値計算法

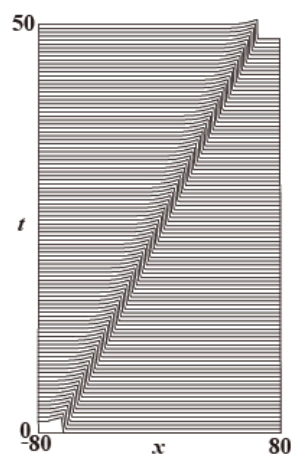


$$z = x - ct$$

c は速度

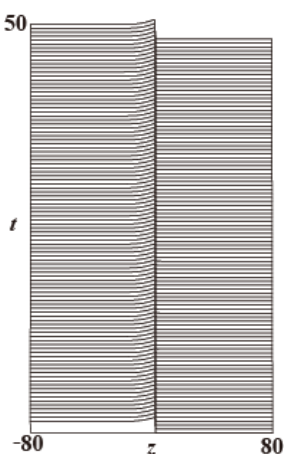


進行パルス波の
数値計算法と同じ手法



$$z = x - ct$$

c は速度



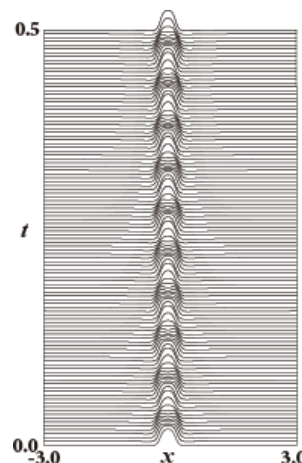
$$\begin{cases} DU_{zz} + cU_z + F(U) = 0, \\ \int_{-L}^L \bar{U}'(z) \cdot U(z) dz = 0, \\ U_z(-L) = 0, \quad U_z(L) = 0 \end{cases}$$

ノイマン境界条件

周期解の数値計算法

反応拡散系のパルス波 (2)

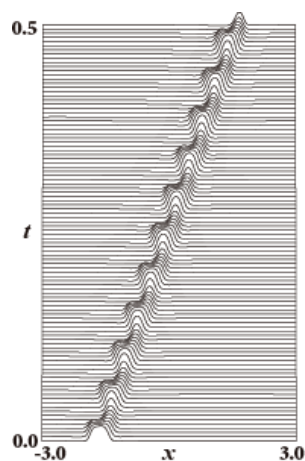
③ 脈動定常パルス波



$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + F(U), \\ U(t, x) = U(t + T, x). \end{cases}$$

T は周期

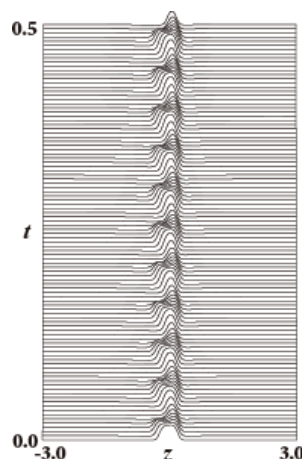
④ 脈動進行パルス波



x座標系での

脈動進行パルス波

$$z = x - ct$$



z座標系での

脈動定常パルス波

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + F(U), \\ U(t, z) = U(t + T, z). \end{cases}$$

c は速度

T は周期

定義3.7 反応拡散系(3.1) の解 $u(t; x)$ が周期 T の脈動定常パルス波(standing breather pulse) であると
は次の方程式を満たす解($U(t; x); T > 0$) が存在することである :

$$\left\{ \begin{array}{l} U_t = DU_{xx} + f(U), \quad t > 0, x \in [-L, L) \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L), \quad t > 0 \\ U(t, x) = U(t + T, x), \quad t \geq 0, x \in [-L, L). \end{array} \right.$$

このとき, 周期 T は $U(t; x) = U(t + T; x)$ を満たす最小正定数とする.

定義3.8 反応拡散系(3.1) の解 $u(t; x)$ が平均速度 c , 周期 T の
 脈動進行パルス波(travelling breather pulse)
 であるとは次の方程式を満たす解($U(t; z); c; T > 0$) が存在す
 ることである：

$$\left\{ \begin{array}{l} U_t = DU_{zz} + cU_z + f(U), \quad t > 0, z \in [-L, L), \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), \quad t > 0, \\ U(t, z) = U(t + T, z), \quad t \geq 0, z \in [-L, L). \end{array} \right.$$

ただし, $z = x - ct$, T の定義は定義3.7 と同様である.

脈動進行パルス波の数値計算法

$$(**) \begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + F(U), & t \in [0, T], z \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t \in [0, T], \\ U(0, z) = U(T, z), & z \in [-L, L] \end{cases}$$

の解 (U, T, c) (T は周期, c は速度) を数値的に求めるには?

(**) に対し, $\tau = \frac{t}{T}$ と変数変換を行う:

$$(**1) \begin{cases} U_\tau = T(DU_{zz} + cU_z + F(U)), & \tau \in [0, 1], z \in [-L, L], \\ U(\tau, -L) = U(\tau, L), \quad U_z(\tau, -L) = U_z(\tau, L), & \tau \in [0, 1], \\ U(0, z) = U(1, z), & z \in [-L, L]. \end{cases}$$

初期値 $U(0, z)$ に対し (**1) の時間発展した解を $\Phi(\tau, z; U(0, z), T, c)$ とする.

時間方向の境界条件より

$$\mathbf{H}(U(0, z), T, c) \equiv \Phi(1, z; U(0, z), T, c) - U(0, z) = \mathbf{0}$$

$(U(0, z), T, c)$ をニュートン法を用いて求める.

Newton Single Shooting Method (NSSM)

周期軌道上の近くの初期値 $(U(0, z), T, c)$ を選ぶ



初期値に対し，時間 $\tau = 1$ 経過したときの時間発展解 $\Phi(1, z; U(0, z), T, c)$ を求める



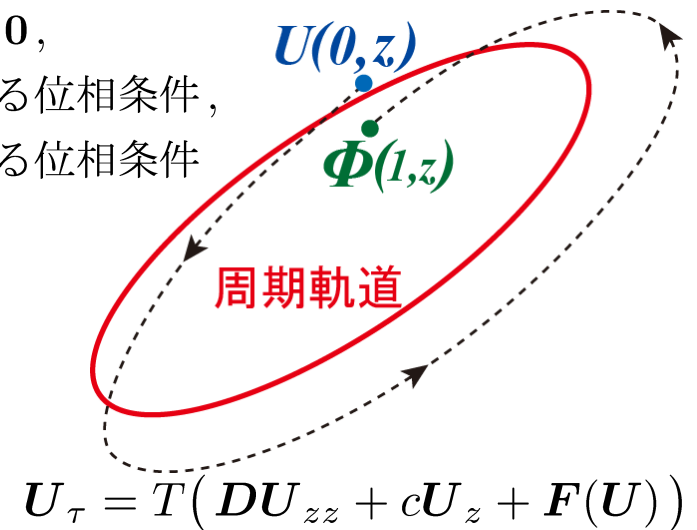
$$\begin{cases} H(U, T, c) = \Phi(1, z) - U(0, z) = 0, \\ P_1(U, T, c) = 0 \leftarrow \text{時間方向に対する位相条件}, \\ P_2(U, T, c) = 0 \leftarrow \text{空間方向に対する位相条件} \end{cases}$$

$$\begin{cases} U = \tilde{U}, \\ T = \tilde{T}, \\ c = \tilde{c} \end{cases}$$

満たさない

満たす

周期解



ニュートン法を用いて初期値を周期軌道上に乗るよう修正する

$$\begin{cases} D H(U, T, c) \Delta U = H(U, T, c), \\ P_{1_U}(U, T, c) \Delta T = P_1(U, T, c), \\ P_{2_U}(U, T, c) \Delta c = P_2(U, T, c) \end{cases}$$

解の更新

$$\begin{cases} \tilde{U} = U - \Delta U, \\ \tilde{T} = T - \Delta T, \\ \tilde{c} = c - \Delta c \end{cases}$$

ニュートン法の主な計算部分

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} - \mathbf{I} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$$

のヤコビ行列を作る部分と LU 分解

数値微分

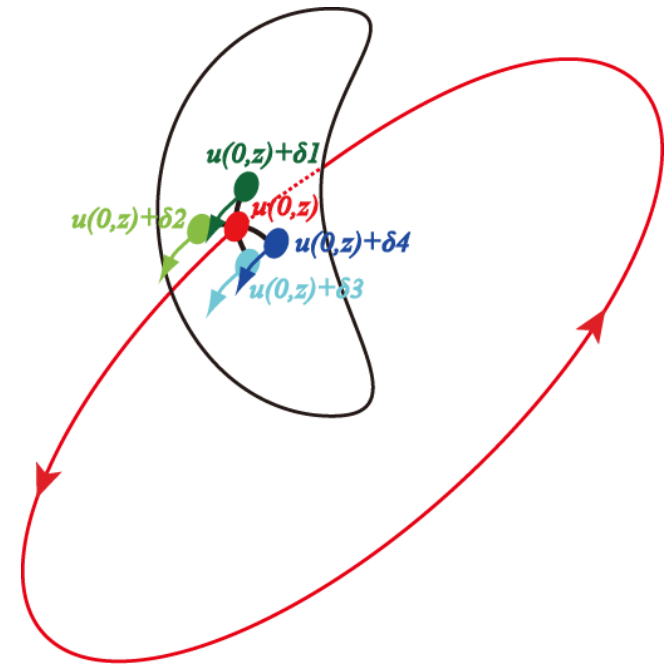
$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} \approx \frac{\Phi(1, z; \mathbf{u} + \delta, T, c) - \Phi(1, z; \mathbf{u}, T, c)}{\delta}$$

離散化

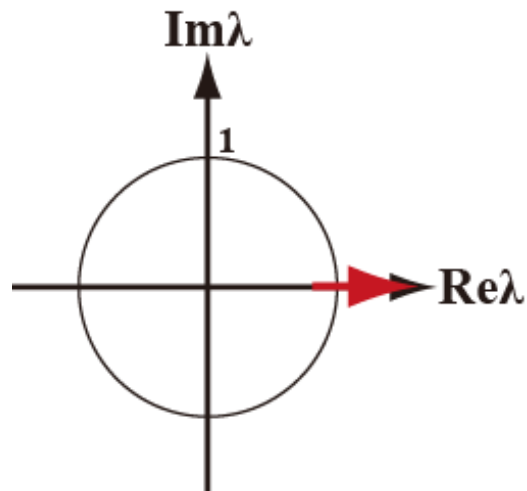
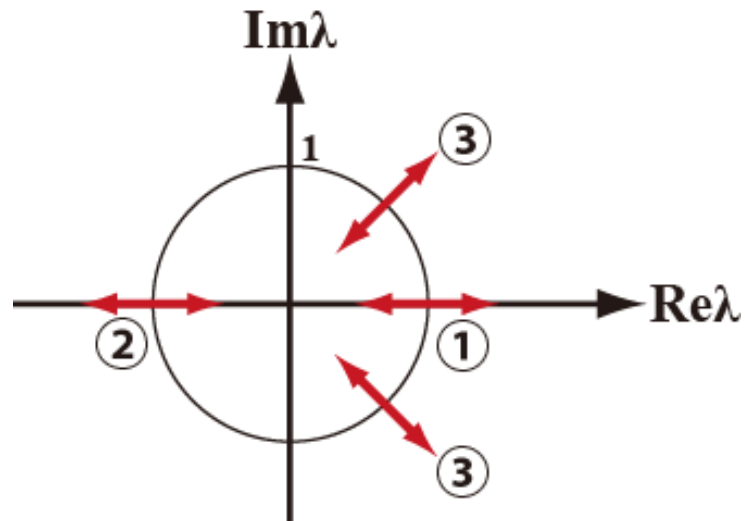
n 変数の反応拡散系に対し空間を N 分割する場合

$nN + 3$ 回の発展方程式を解くことになる。

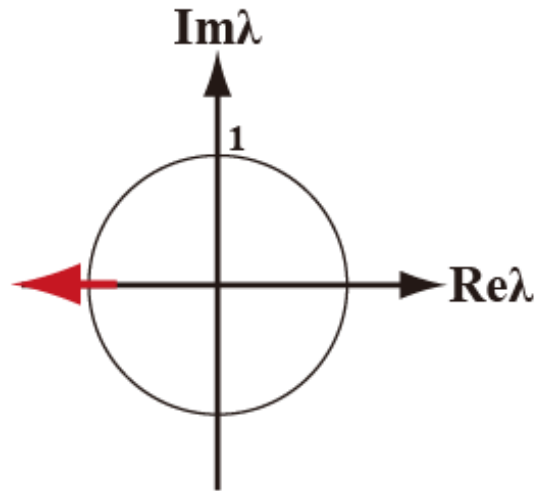
発展方程式の部分は独立して解けるので並列化が容易で高速化が可能である。



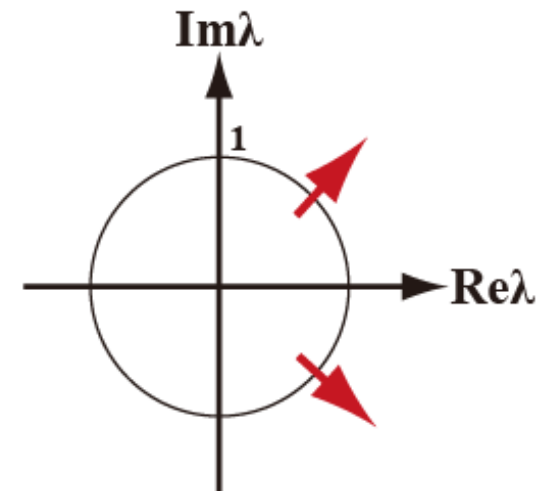
周期解の分岐現象



pitchfork,
saddle-node,
transcritical



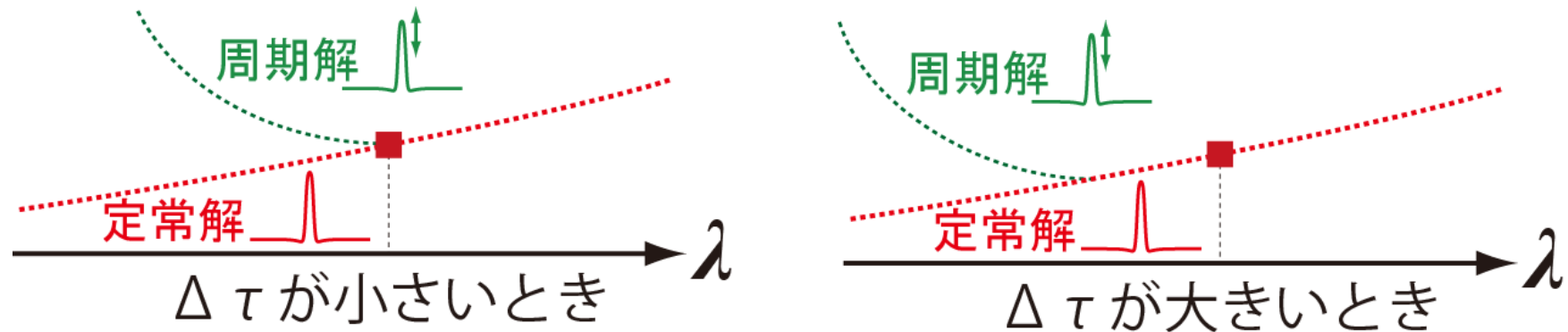
period doubling



torus

問題点

- 不安定周期解の Monodromy 行列 ($\frac{\partial \Phi}{\partial U}$) の固有値の絶対値が大きい場合、時間発展解は周期軌道から離れやすくなるのでニュートン法が発散しやすい。
($\Phi(1, z)$ が周期軌道の近くに帰ってこない.)
- 周期 T が大きいほど Monodromy 行列の固有値の絶対値 (μ_i) が大きくなる。
定常解のホップ分岐点では $\mu_i = \exp(T\lambda_i)$ の関係式がある。
 λ_i は定常解のホップ分岐点に対する線形化行列の固有値。



- 不安定定常解からのホップ分岐により不安定周期解が現れるとき、一番最初の不安定周期解を求めるための初期値を探すのが苦労。

初期値の与え方: $U(\hat{t}, x) = \bar{U}(x) + \varepsilon (\sin(2\pi\hat{t}) \Phi_R(x) + \cos(2\pi\hat{t}) \Phi_I(x))$, $\hat{t} \in [0, 1)$

周期の与え方: $T = \frac{2\pi}{\lambda_I}$

ε は小さな値である

$\bar{U}(x), \lambda_I, \Phi_R(x), \Phi_I(x)$ はそれぞれホップ分岐点での不安定定常解, 固有値の虚数部分, 固有値に対する固有関数の実部と虚部である

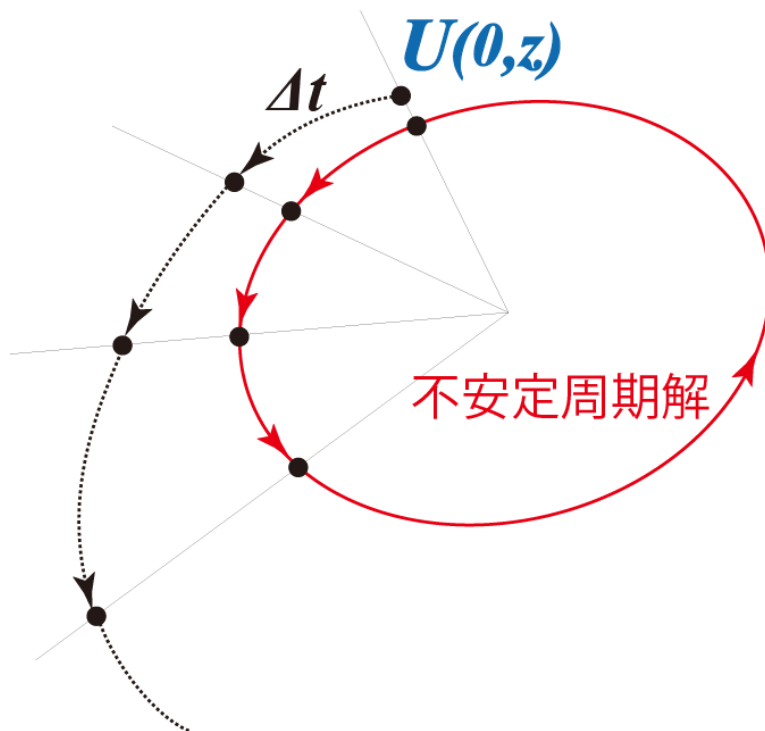
問題点（不安定周期解）

- Monodromy 行列 $(\frac{\partial \Phi}{\partial u})$ の固有値の絶対値が大きい場合
- 周期 T が大きい場合



ニュートン法が発散しやすい

($\Phi(1, z)$ が周期軌道の近くに帰ってこない)



Monodromy行列

$$\downarrow$$
$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial u} - I & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial u} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial u} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$$

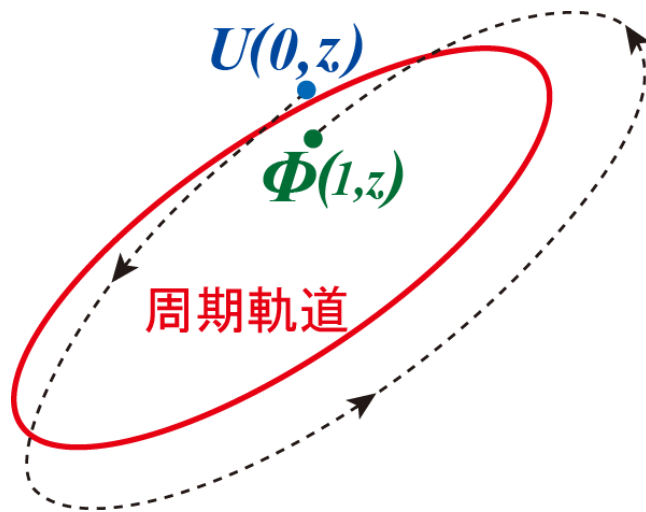
解決法

Newton-Multiple Shooting Method (NMSM)を用いる

時間 $[0,1]$ 上の m 個の初期値を周期軌道上に乗るように修正する方法

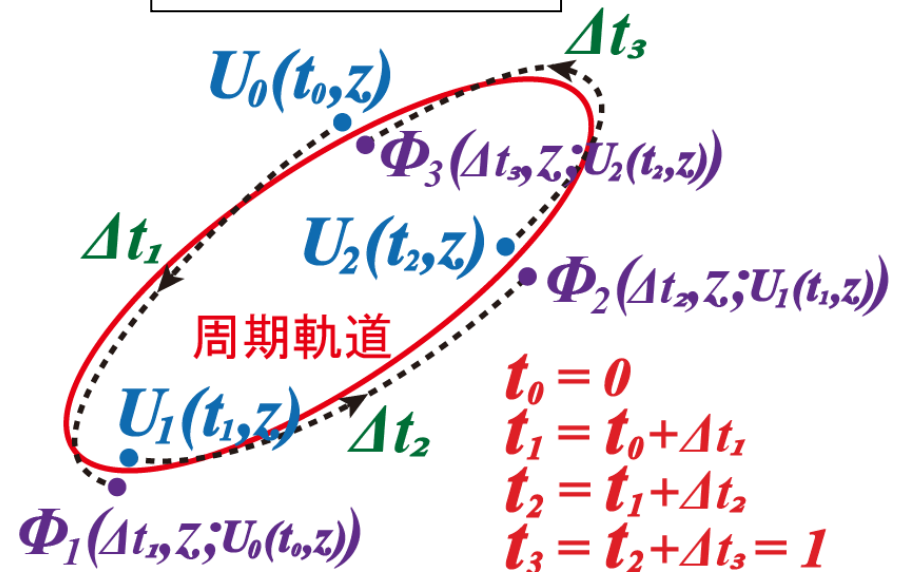
NSSM

$m = 1$



NMSM

$m = 3$



$$\begin{cases} H(\mathbf{U}, T, c) = \Phi(1, z) - \mathbf{U}(0, z) = \mathbf{0}, \\ P_1(\mathbf{U}, T, c) = 0 \leftarrow \text{時間方向に対する位相条件}, \\ P_2(\mathbf{U}, T, c) = 0 \leftarrow \text{空間方向に対する位相条件}. \end{cases}$$

初期値のみをNewton法で修正する

$$\begin{cases} H_1(\mathbf{U}_0, \mathbf{U}_1, T, c) = \Phi_1(\Delta t_1, z; \mathbf{U}_0) - \mathbf{U}_1(t_1, z) = \mathbf{0}, \\ H_2(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, T, c) = \Phi_2(\Delta t_2, z; \mathbf{U}_1) - \mathbf{U}_2(t_2, z) = \mathbf{0}, \\ H_3(\mathbf{U}_2, \mathbf{U}_0, T, c) = \Phi_3(\Delta t_3, z; \mathbf{U}_2) - \mathbf{U}_0(t_3, z) = \mathbf{0}, \\ P_1(\mathbf{U}_0, \mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, T, c) = 0, \\ P_2(\mathbf{U}_0, \mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, T, c) = 0. \end{cases}$$

NSSM

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} - \mathbf{I} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$$

$(nN+2)$ 次元非
線形連立方程式

NMSM

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{u}_1} & -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \frac{\partial \Phi_1}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_1}{\partial c} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_2} & -\mathbf{I} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial c} \\ -\mathbf{I} & \mathbf{0} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}_1 \\ \Delta \mathbf{u}_2 \\ \Delta \mathbf{u}_3 \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$$

LU分解法で計算すると
およそ 3^3 倍計算時間が必要

$(3nN+2)$ 次元非
線形連立方程式

Condensation Method

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{u}_1} & -I & 0 & \frac{\partial \Phi_1}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_1}{\partial c} \\ 0 & \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_2} & -I & \frac{\partial \Phi_2}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_2}{\partial c} \\ -I & 0 & \frac{\partial \Phi_3}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial T} & \frac{\partial \Phi_3}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_2} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}_3} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}_1 \\ \Delta \mathbf{u}_2 \\ \Delta \mathbf{u}_3 \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}$$

各行 $i (1 \leq i \leq 3)$ に対して

$$\Delta \mathbf{u}_{i+1} = \frac{\partial \Phi_i}{\partial \mathbf{u}_i} \Delta \mathbf{u}_i + \frac{\partial \Phi_i}{\partial T} \Delta T + \frac{\partial \Phi_i}{\partial c} \Delta c - H_i, \quad \text{ただし, } \Delta \mathbf{u}_1 = \Delta \mathbf{u}_4$$

の関係より

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial \mathbf{u}_1} - I & \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial T} & \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial c} \\ \frac{\partial \hat{P}_1}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial \hat{P}_1}{\partial T} & \frac{\partial \hat{P}_1}{\partial c} \\ \frac{\partial \hat{P}_2}{\partial \mathbf{u}_1} & \frac{\partial \hat{P}_2}{\partial T} & \frac{\partial \hat{P}_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}_1 \\ \Delta T \\ \Delta c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H} \\ \hat{P}_1 \\ \hat{P}_2 \end{pmatrix}$$

を得る

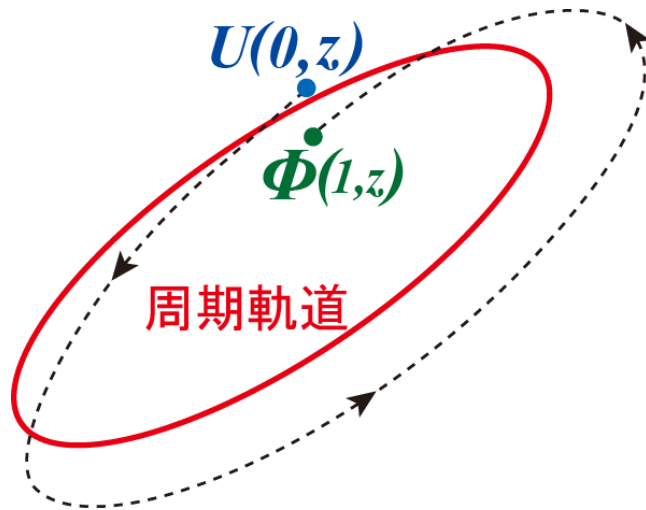
$$\frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial \hat{\Phi}_3}{\partial \mathbf{u}_3} \frac{\partial \hat{\Phi}_2}{\partial \mathbf{u}_2} \frac{\partial \hat{\Phi}_1}{\partial \mathbf{u}_1}, \quad \left[\frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial \mathbf{u}_1} \frac{\partial \hat{\Phi}}{\partial c} \hat{H} \right] = \frac{\partial \Phi_3}{\partial \mathbf{u}_3} \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_2} \left[\frac{\partial \Phi_1}{\partial T} \frac{\partial \Phi_1}{\partial c} H_1 \right] + \frac{\partial \Phi_3}{\partial \mathbf{u}_3} \left[\frac{\partial \Phi_2}{\partial T} \frac{\partial \Phi_2}{\partial c} H_2 \right] + \left[\frac{\partial \Phi_3}{\partial T} \frac{\partial \Phi_3}{\partial c} H_1 \right],$$

$$\frac{\partial \hat{P}_i}{\partial \mathbf{u}_1} = \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{u}_1} + \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{u}_2} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{u}_1} + \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{u}_3} \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_2} \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{u}_1}, \quad i = 1, 2,$$

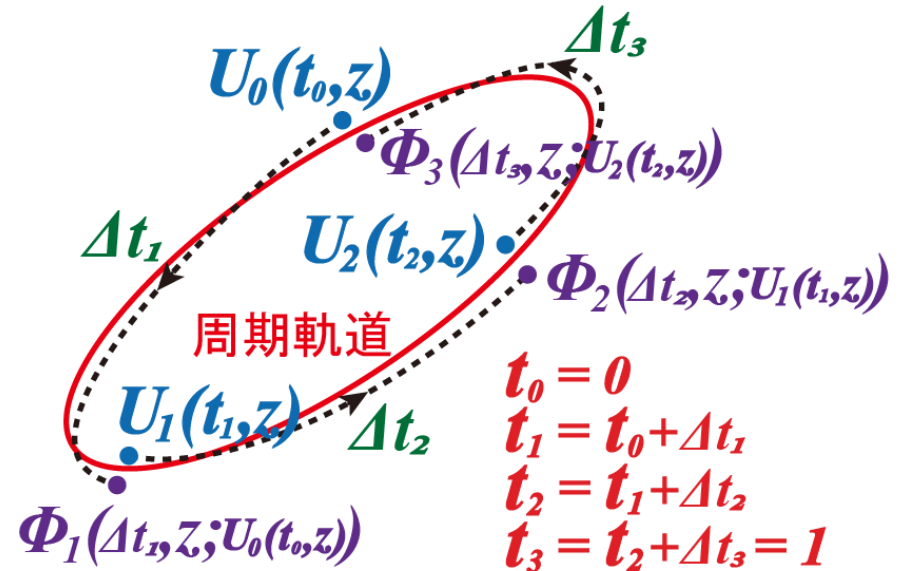
$$\left[\frac{\partial \hat{P}_i}{\partial T} \frac{\partial \hat{P}_i}{\partial c} \hat{P}_i \right] = \left[\frac{\partial P_i}{\partial T} \frac{\partial P_i}{\partial c} P_i \right] + \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{u}_2} \left[\frac{\partial \Phi_1}{\partial T} \frac{\partial \Phi_1}{\partial c} H_1 \right] + \frac{\partial P_i}{\partial \mathbf{u}_3} \left(\left[\frac{\partial \Phi_2}{\partial T} \frac{\partial \Phi_2}{\partial c} H_2 \right] + \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_2} \left[\frac{\partial \Phi_1}{\partial T} \frac{\partial \Phi_1}{\partial c} H_1 \right] \right), \quad i = 1, 2$$

周期解の安定性

NSSM



NMSM



$$\Phi(1, z; \mathbf{u}_0^*) = \Phi_3\left(\Delta t_3, z; \Phi_2\left(\Delta t_2, z; \Phi_1\left(\Delta t_1, z; \mathbf{u}_0^*\right)\right)\right)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}_0}(1, z; \mathbf{u}_0^*) = \frac{\partial \Phi_3}{\partial \mathbf{u}_2}(\Delta t_3, z; \mathbf{u}_2^*) \frac{\partial \Phi_2}{\partial \mathbf{u}_1}(\Delta t_2, z; \mathbf{u}_1^*) \frac{\partial \Phi_1}{\partial \mathbf{u}_0}(\Delta t_1, z; \mathbf{u}_0^*)$$

$\mathbf{u}_i^* (0 \leq i \leq 2)$ はニュートン法で収束したときの解

↑
Monodromy行列の固有値を計算して安定性を調べる

様々な数値計算例

例 1 : 2 変数発熱反応拡散系

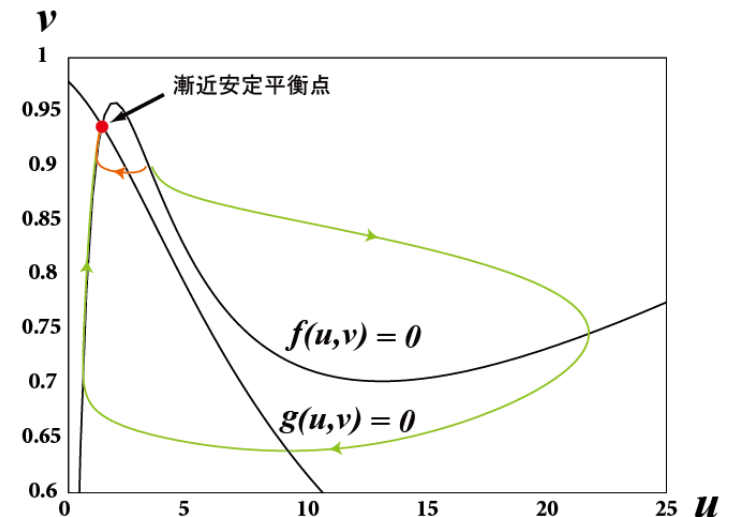
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(-a u + \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + h(1 - v) - \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \end{cases}$$

に対し, 周期境界条件

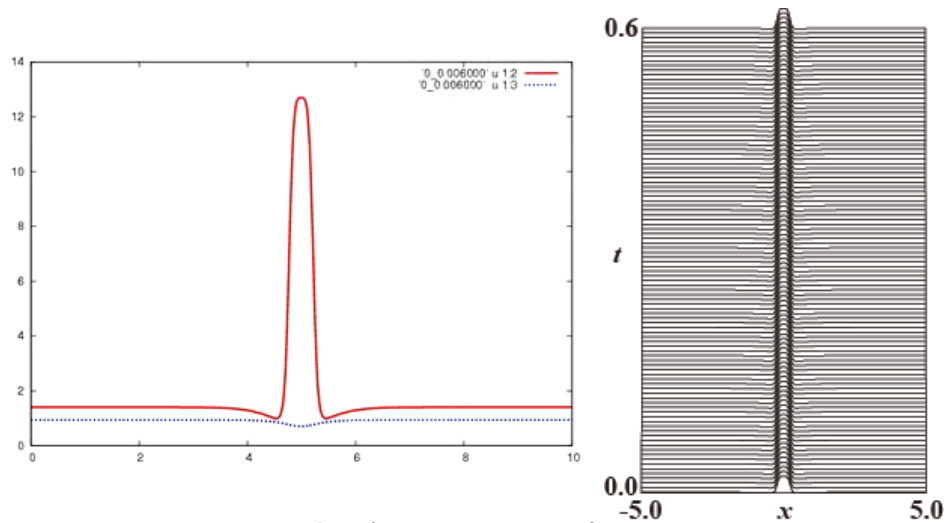
$$\begin{cases} (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \\ (u_x, v_x)(t, -L) = (u_x, v_x)(t, L) \end{cases}$$

を与えて大域的分岐構造を調べる.

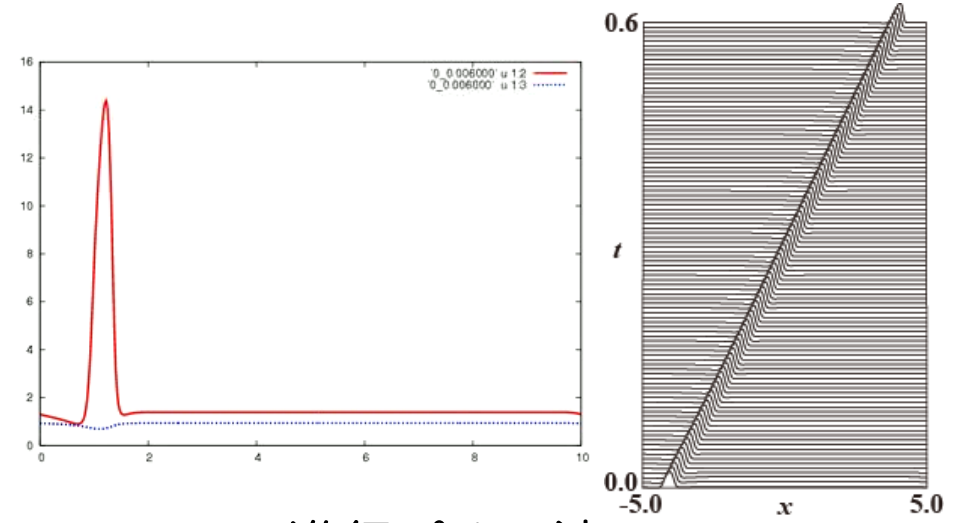
パラメータは $a = 2.0$, $c = 5.0$, $h = 45.0$ と選び (単安定興奮性発熱反応拡散系), d と ε はコントロールパラメータで正の値とする.



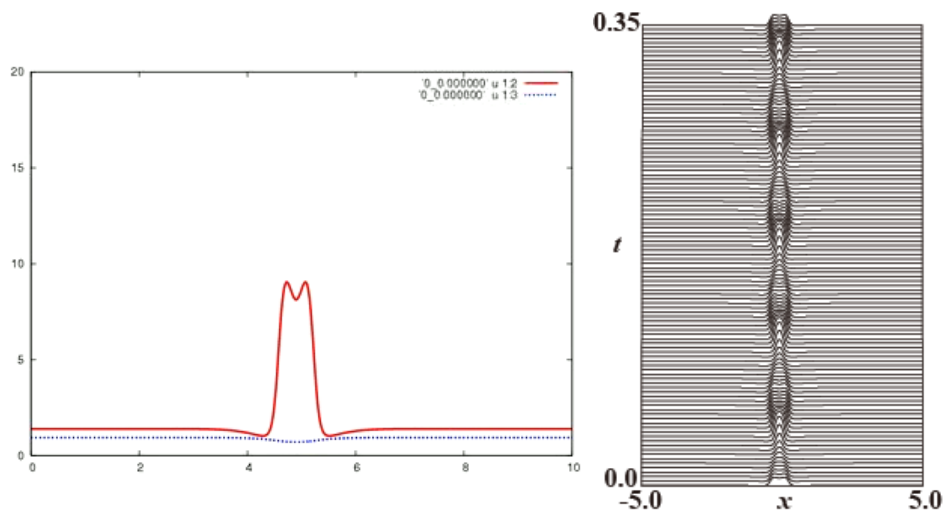
発熱反応拡散系に現れるパルス波



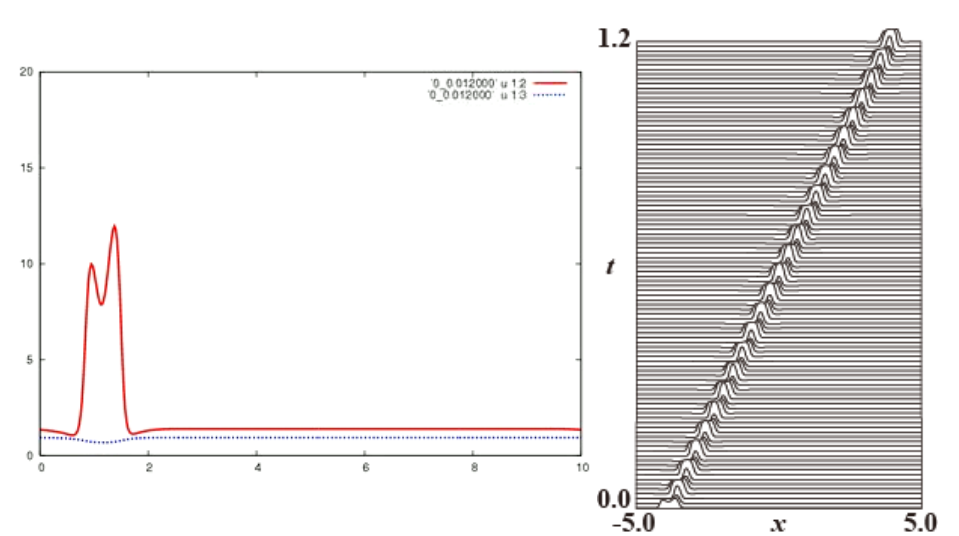
定常パルス波



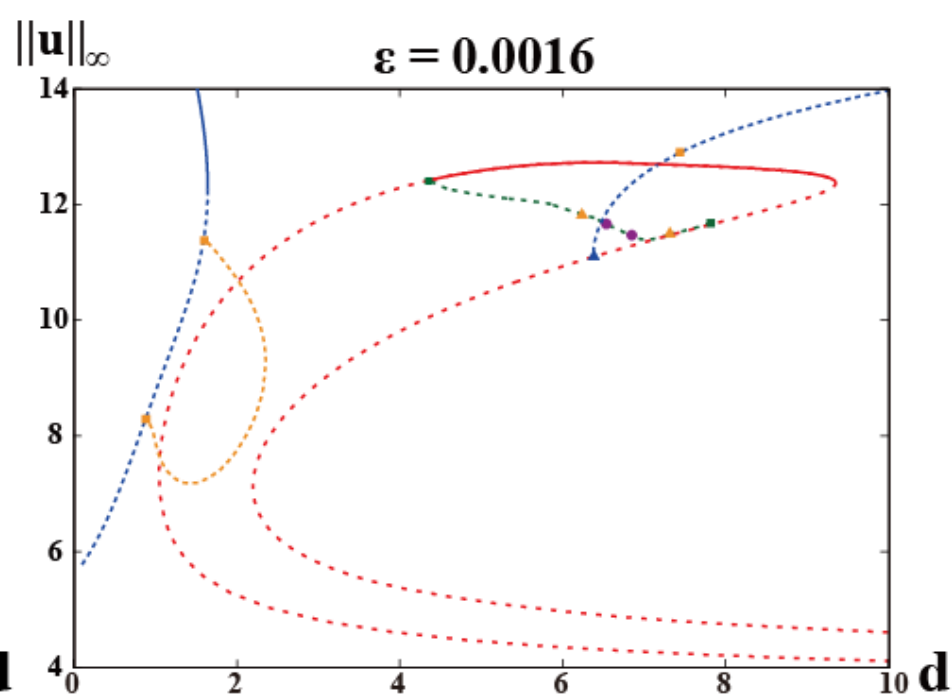
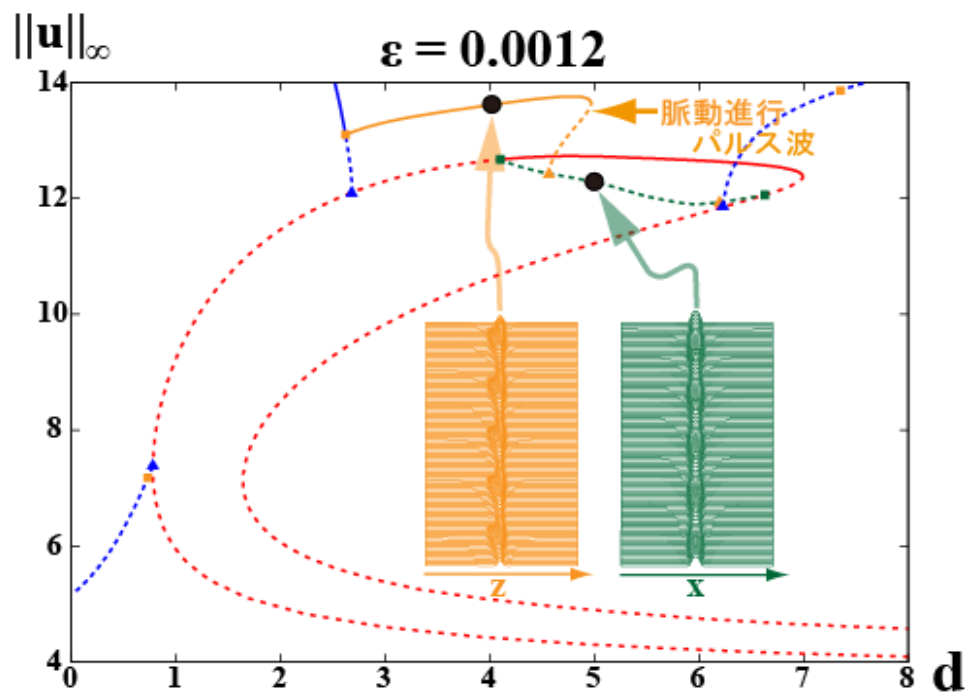
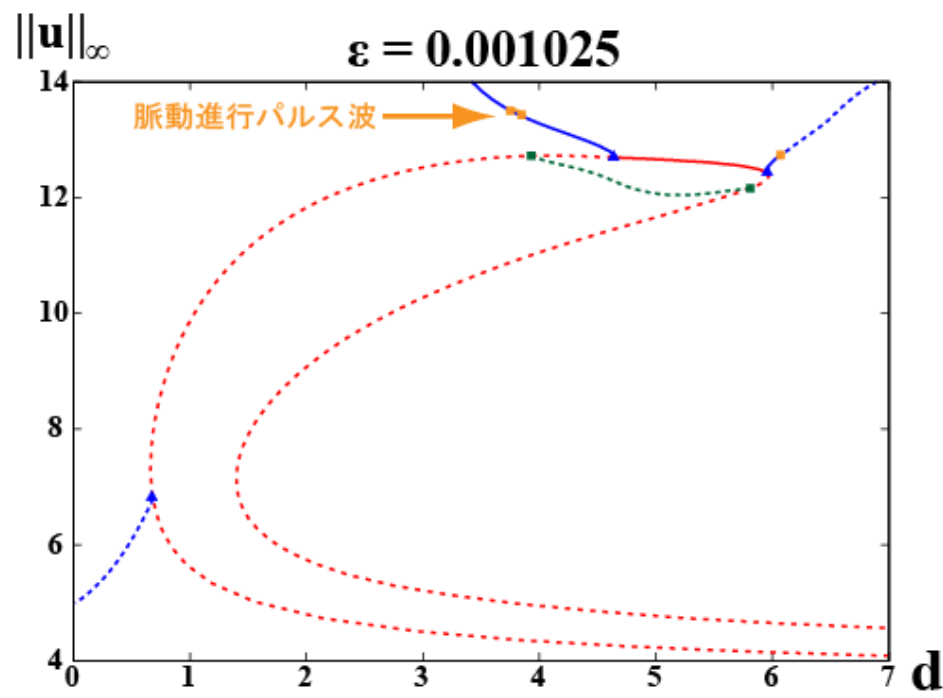
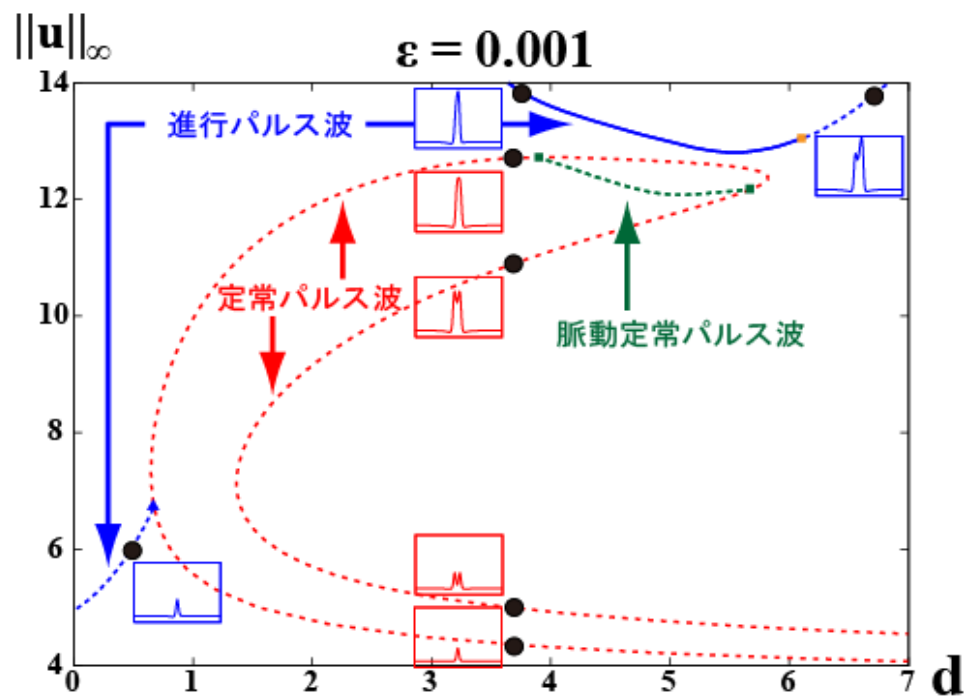
進行パルス波



脈動定常パルス波



脈動進行パルス波

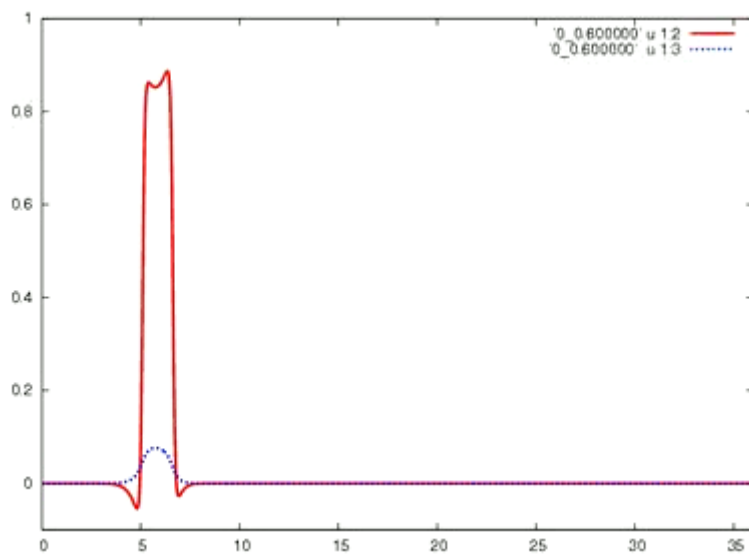
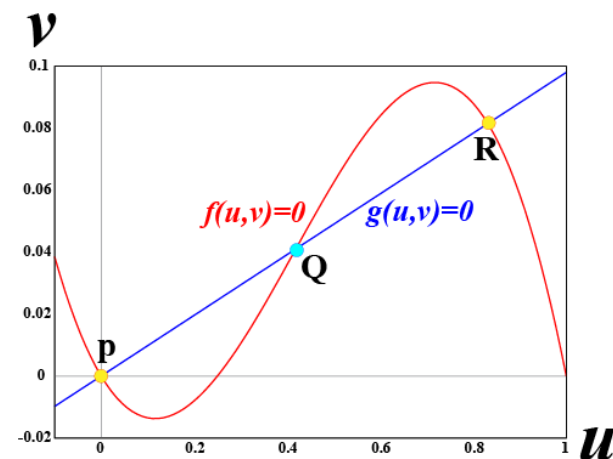


例 2 : 双安定反応拡散系

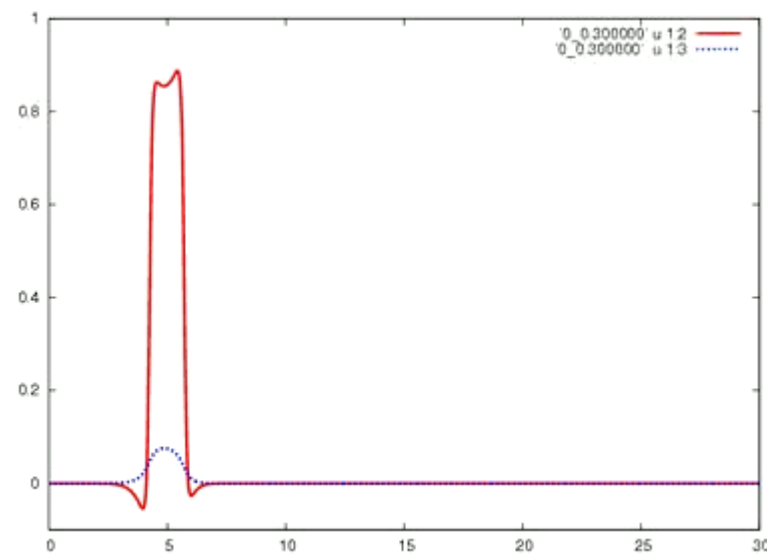
$$\begin{cases} \varepsilon \tau u_t &= \varepsilon^2 u_{xx} + u(1-u)(u-a) - v, \\ v_t &= v_{xx} + u - \gamma v. \end{cases}$$

に対し周期境界条件を与える.

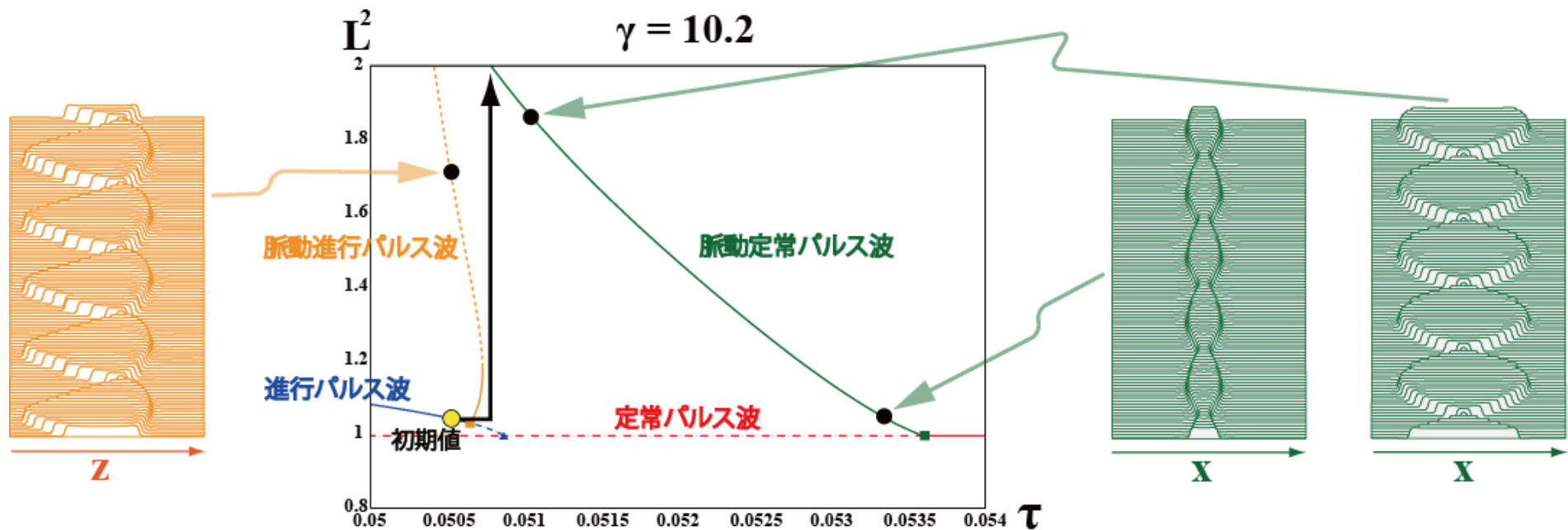
$\varepsilon = 0.04$, $a = 0.25$, γ, τ はフリーパラメータ.



$\gamma = 10.2$

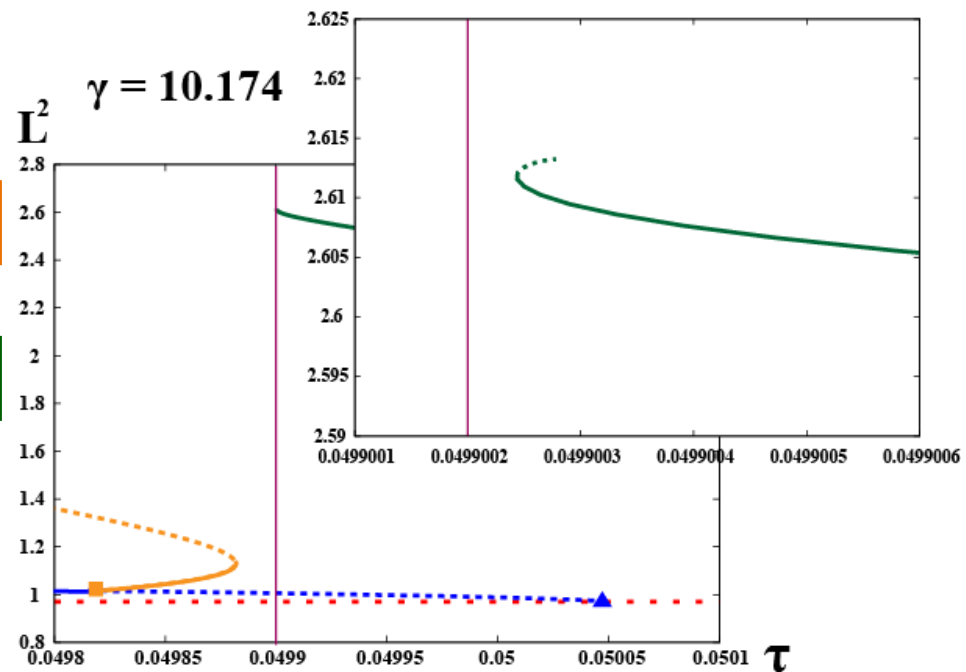


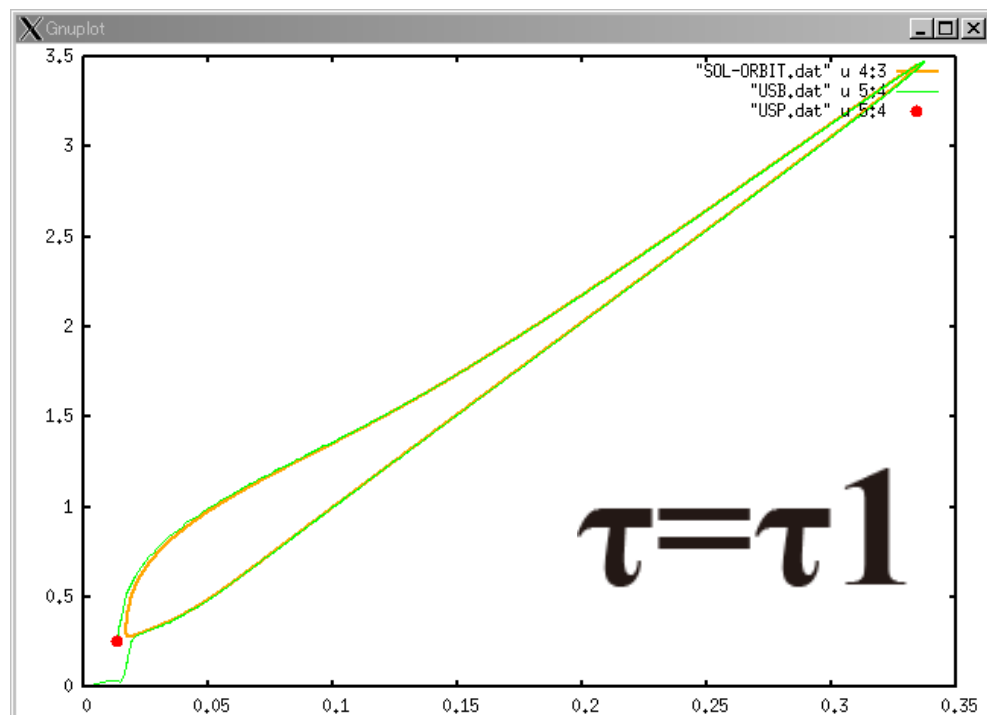
$\gamma = 10.174$



$\gamma = 10.2$

$\gamma = 10.174$



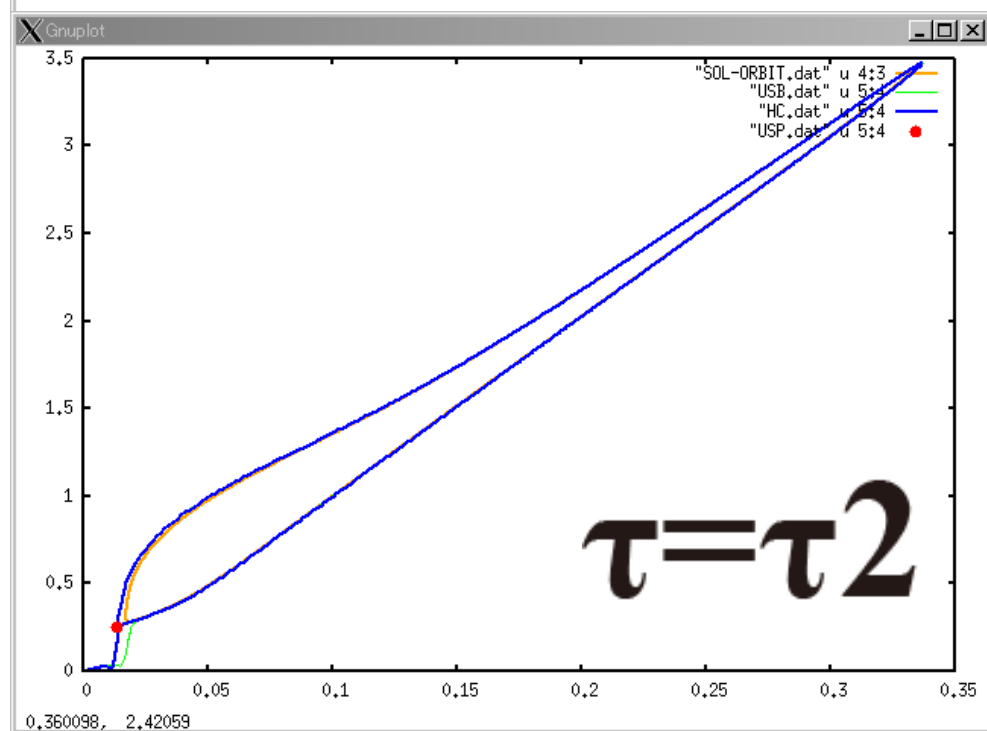


自明平衡解

不安定定常解

$\tau = \tau_1$

脈動定常パルス波

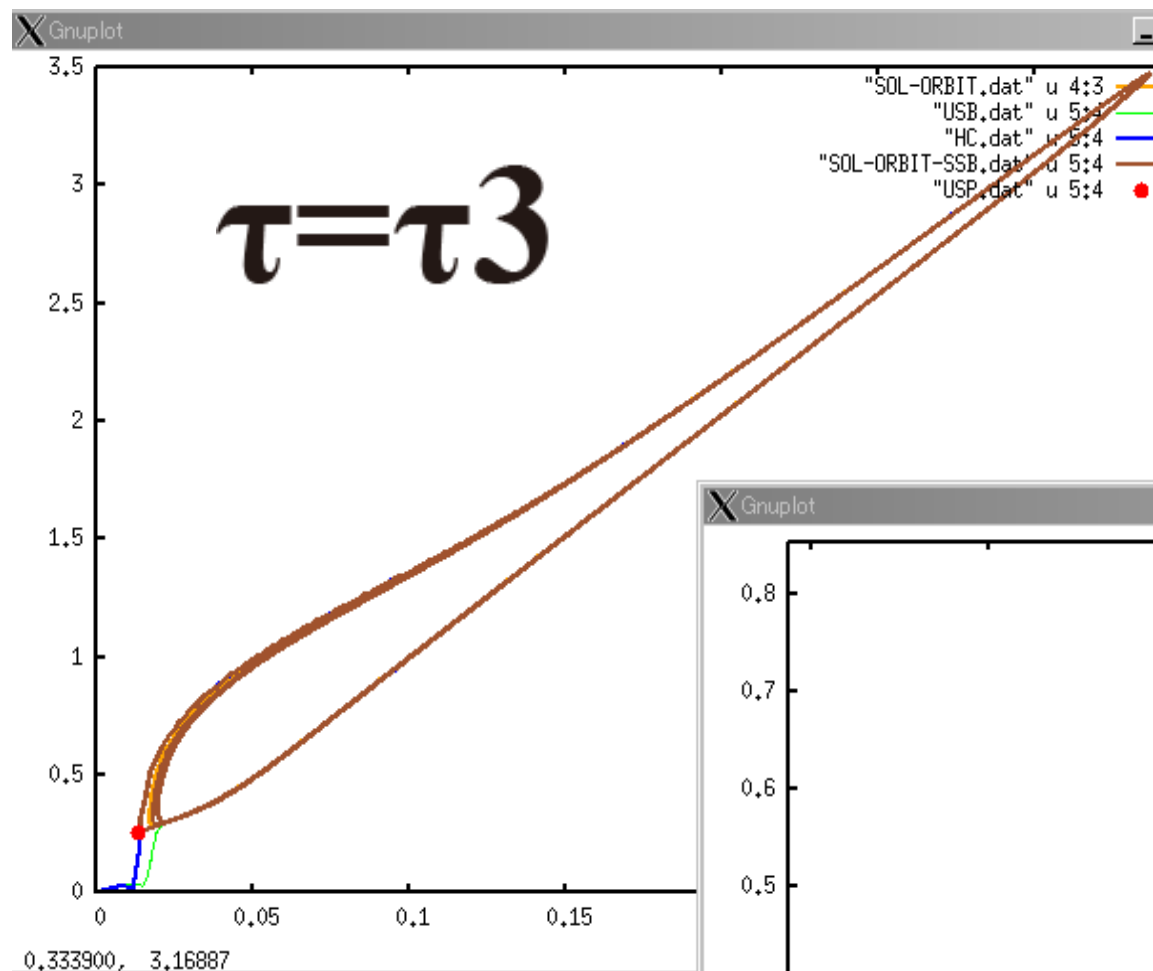


自明平衡解

不安定定常解

$\tau = \tau_2$

脈動定常パルス波

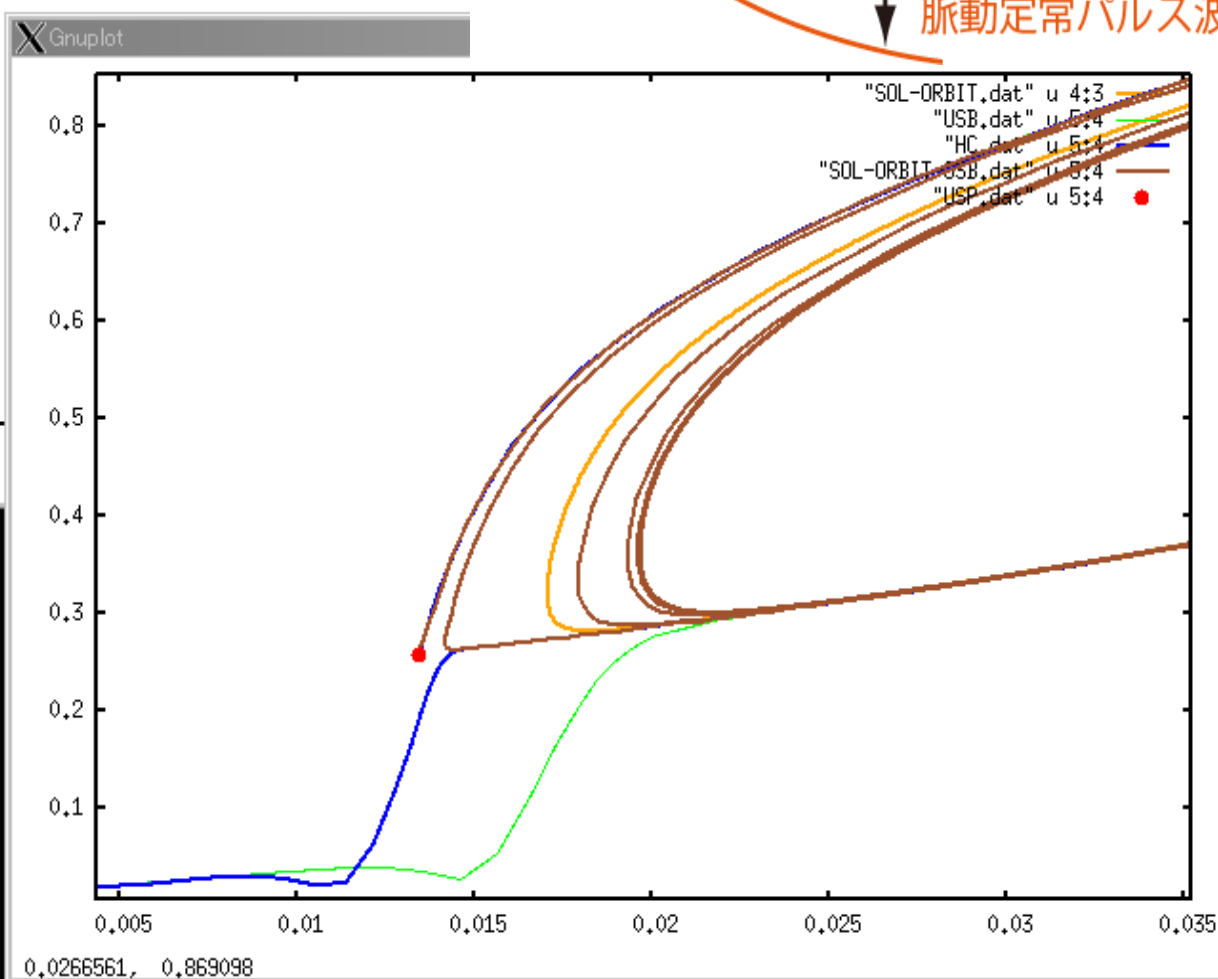


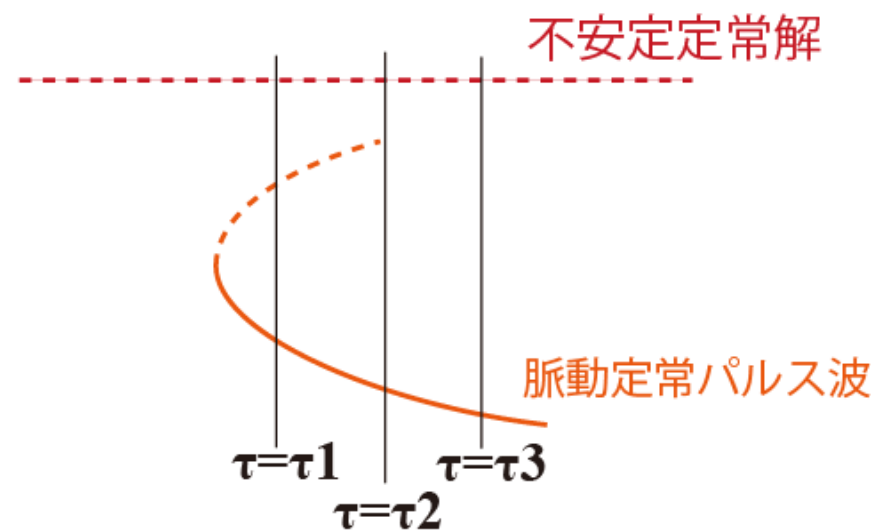
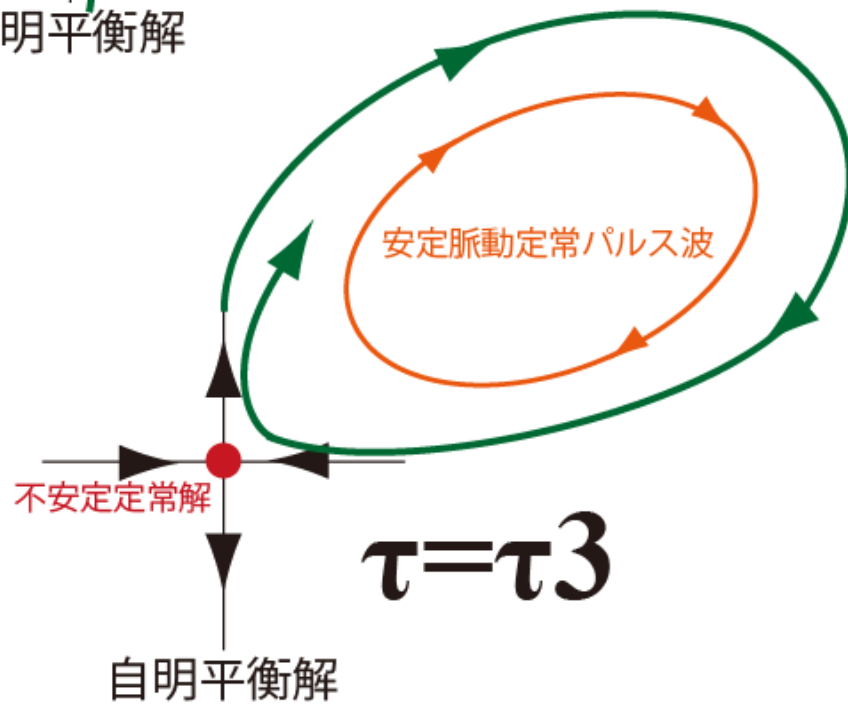
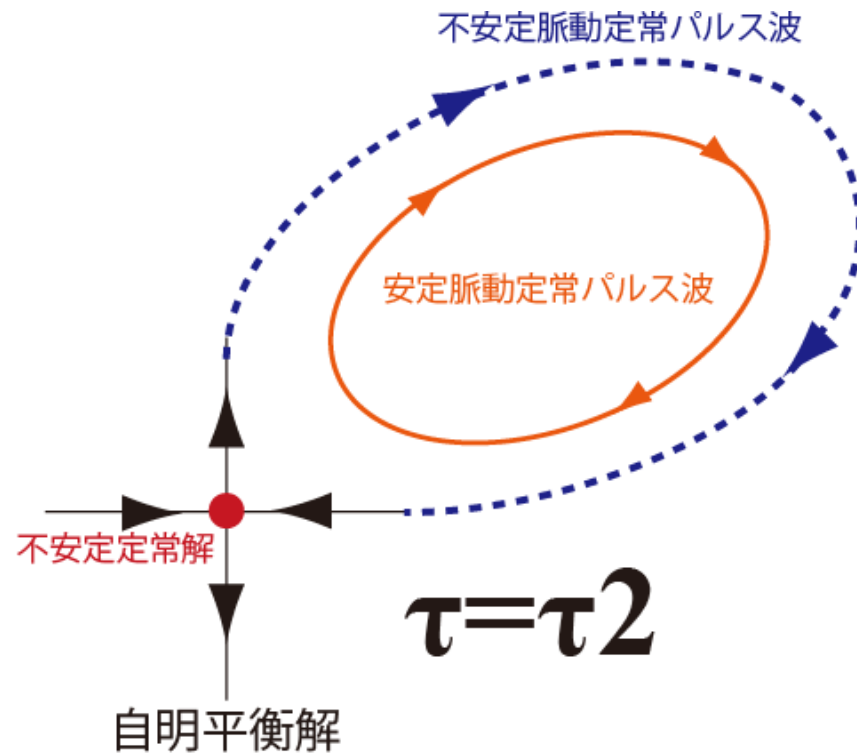
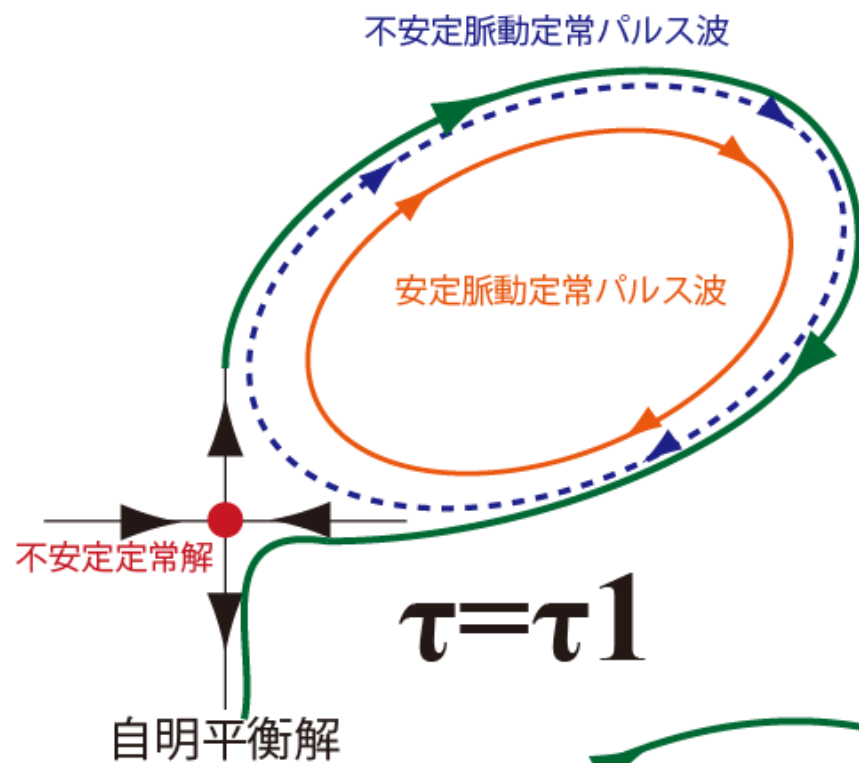
自明平衡解

不安定定常解

$\tau = \tau_3$

脈動定常パルス波



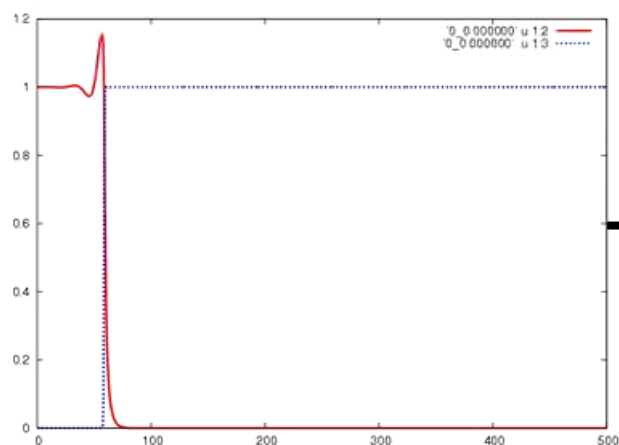


例 3：自己触媒反応方程式

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} + u^m v, \\ v_t = d v_{xx} - u^m v. \end{cases}$$

に対しディレクレ境界条件を与える

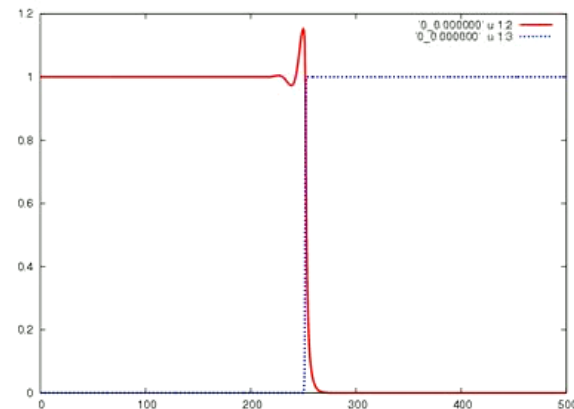
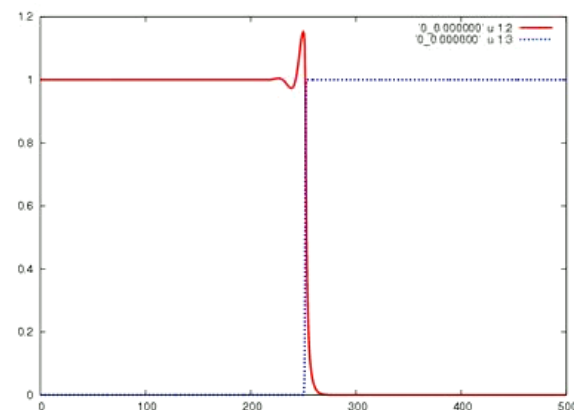
d が十分小さくて, $m \geq 8$ のとき脈動フロント波が現れる

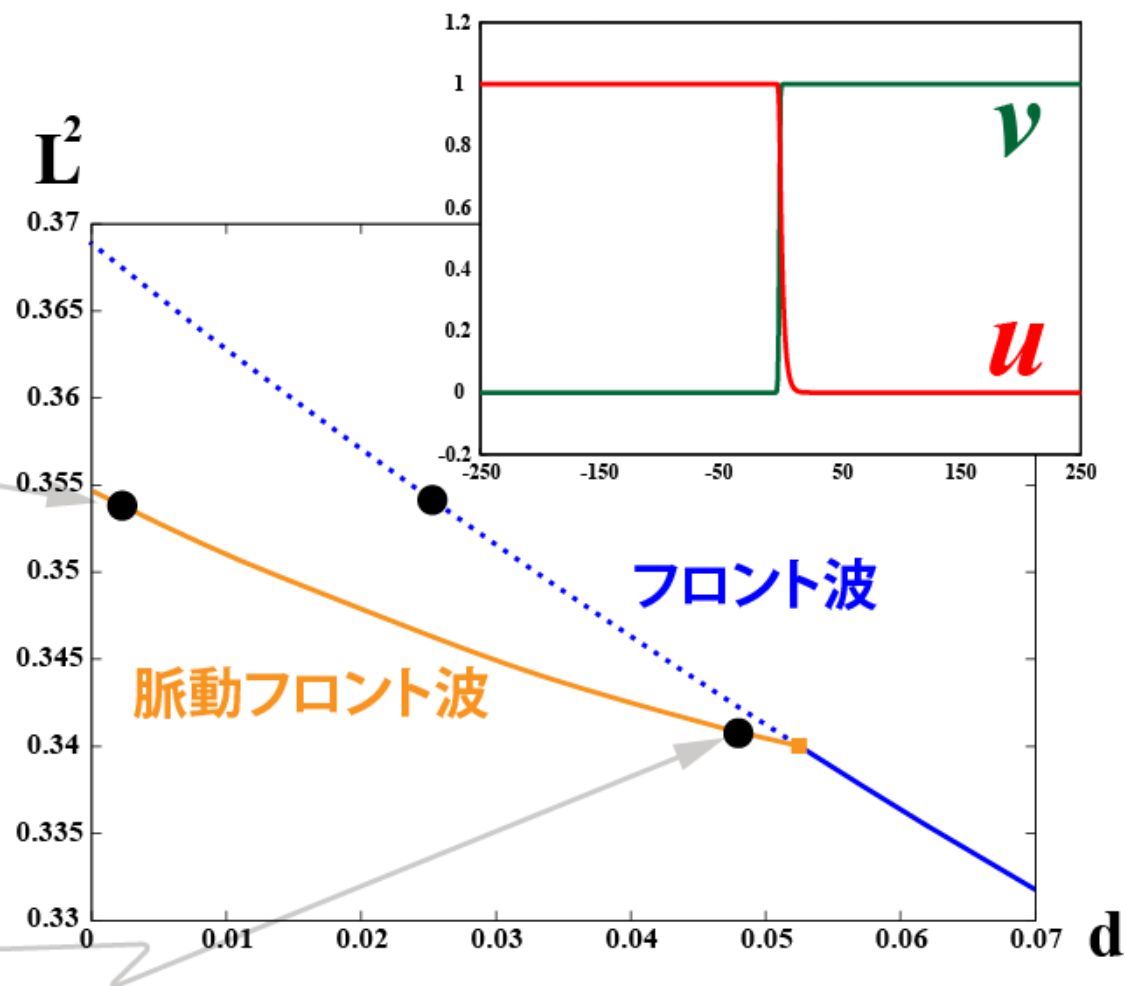
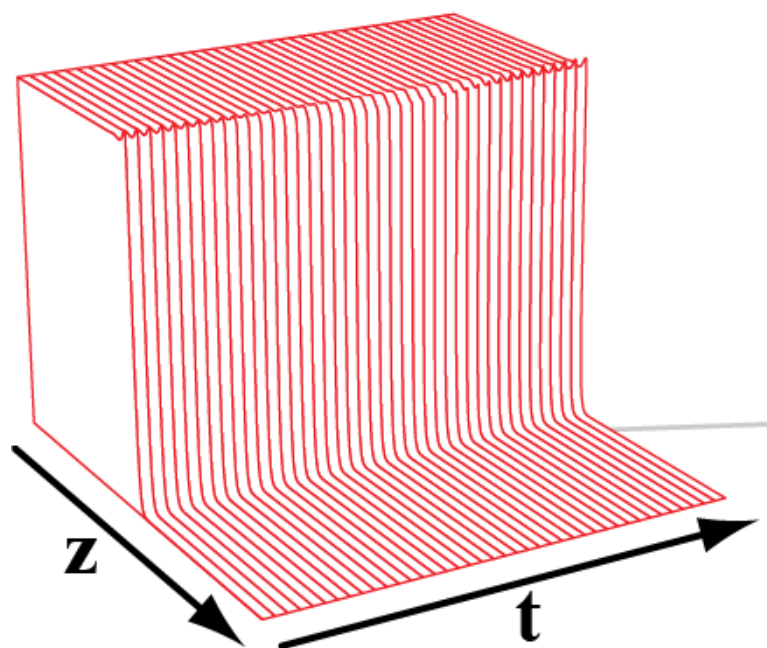
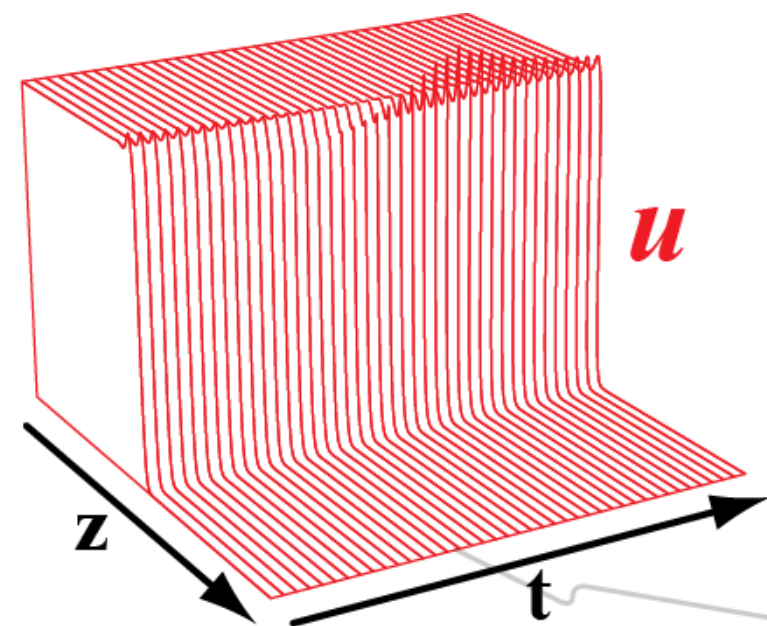


中心差分

動座標系

3次精度風上差分





例 5 : 双安定反応拡散系

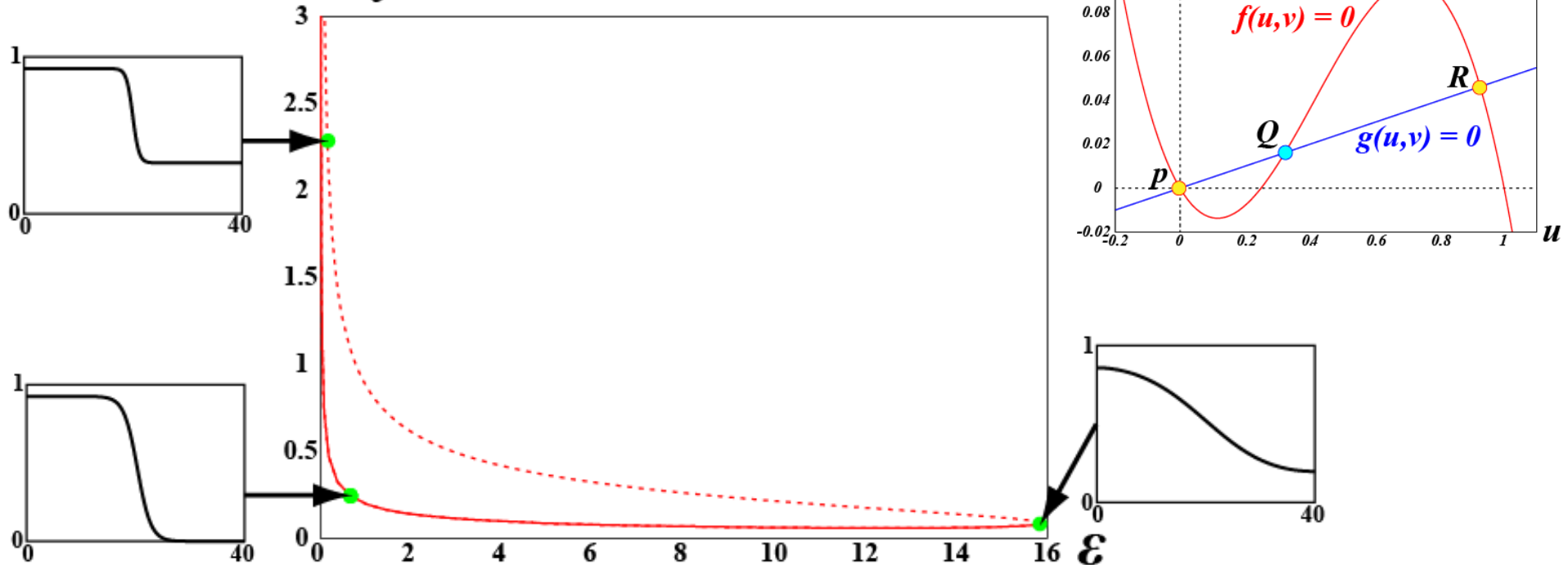
$$\begin{cases} u_t = d_u u_{xx} + \frac{1}{\varepsilon} (u(1-u)(u-a) - v), \\ v_t = d_v v_{xx} + u - \gamma v. \end{cases}$$

ノイマン境界条件を与えてフロント波の分岐構造を調べてみる.

$d_u = 1.0$, $d_v = 0.5$, $a = 0.25$, $\gamma = 20.0$ と選び (双安定系),

ε はコントロールパラメータで正の値とする.

velocity

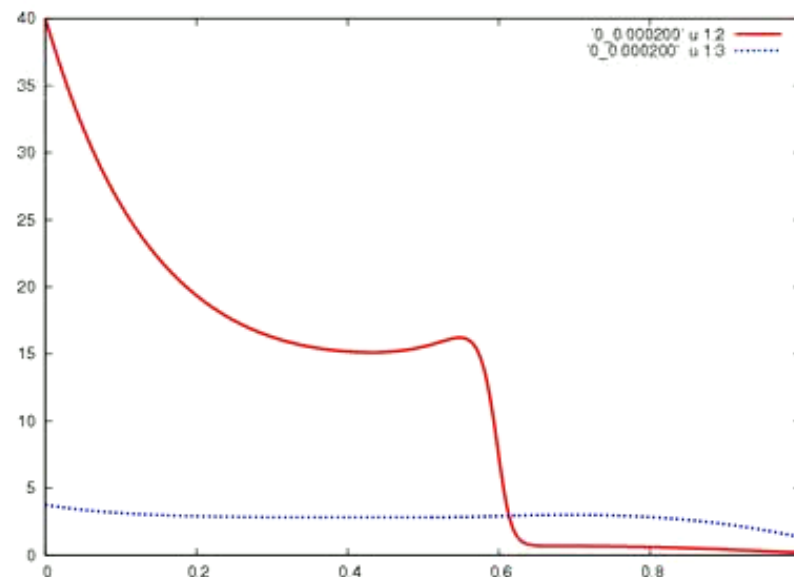


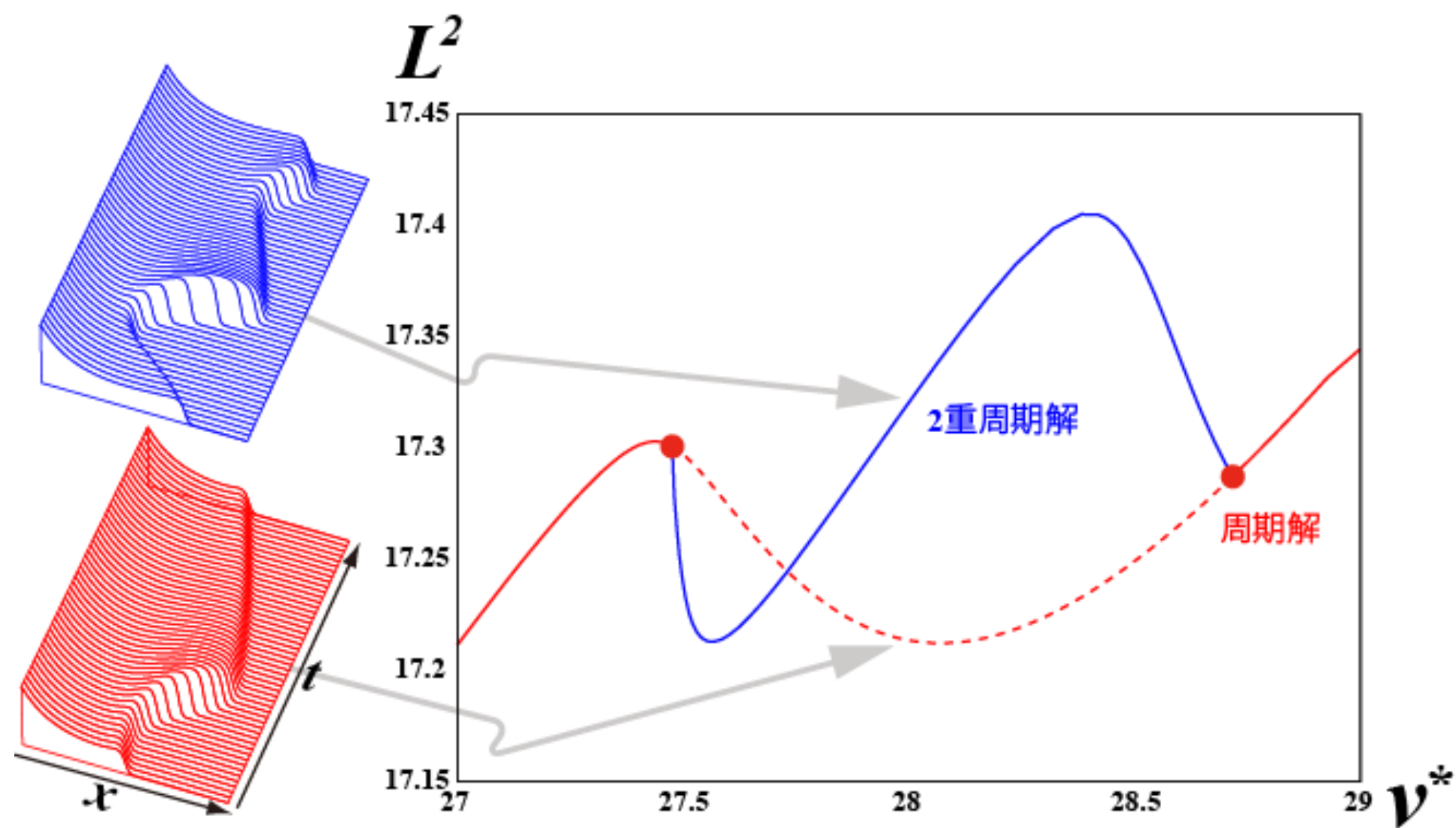
例 4 : 2 変数発熱反応拡散系

$$\begin{cases} u_t = \frac{d_u}{L^2} u_{xx} + \frac{1}{\varepsilon^2} \left(-a u + \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \right), \\ v_t = \frac{d_v}{L^2} v_{xx} + h(v^* - v) - \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \end{cases}$$

に対しディレクレ境界条件を与える.

パラメータは $d_u = d_v = 2.5$, $\varepsilon = 0.01$, $a = 8.0$, $c = 5.0$,
 $h = 45.0$, $v^* =$ コントロールパラメータ.





例 5 : 拡張FHN反応拡散系

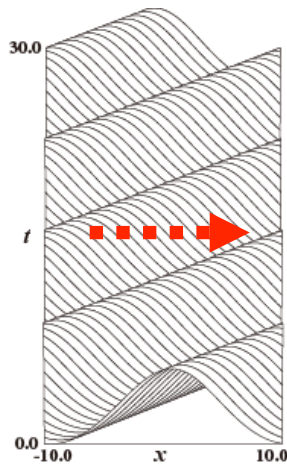
$$\begin{cases} u_t = d_u u_{xx} + p(u - v) - a u^3 - s w, \\ v_t = d_v v_{xx} + q u - v + b u^2, \\ \tau w_t = d_w w_{xx} + u - w \end{cases}$$

に対し, 周期境界条件を与えて大域的分岐構造を調べる.

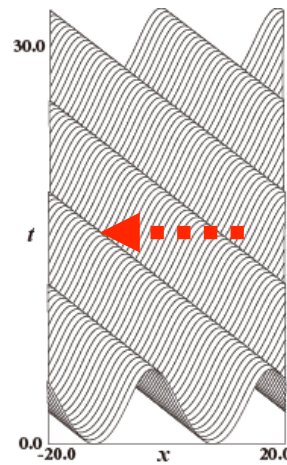
$$d_u = 0.7, d_v = 0.3, d_w = 50.0,$$

$$a = 0.5, b = 1.0, q = 1.5, s = 0.5, \tau = 0.1.$$

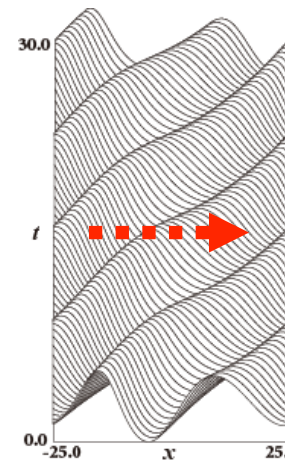
L と p はコントロールパラメータ.



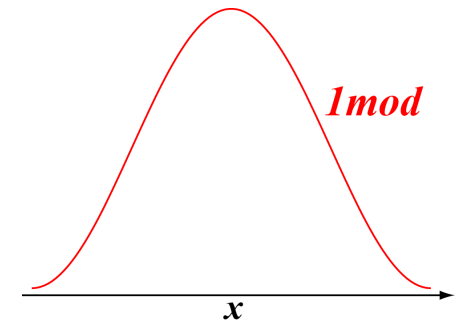
+1RW($L=20$)



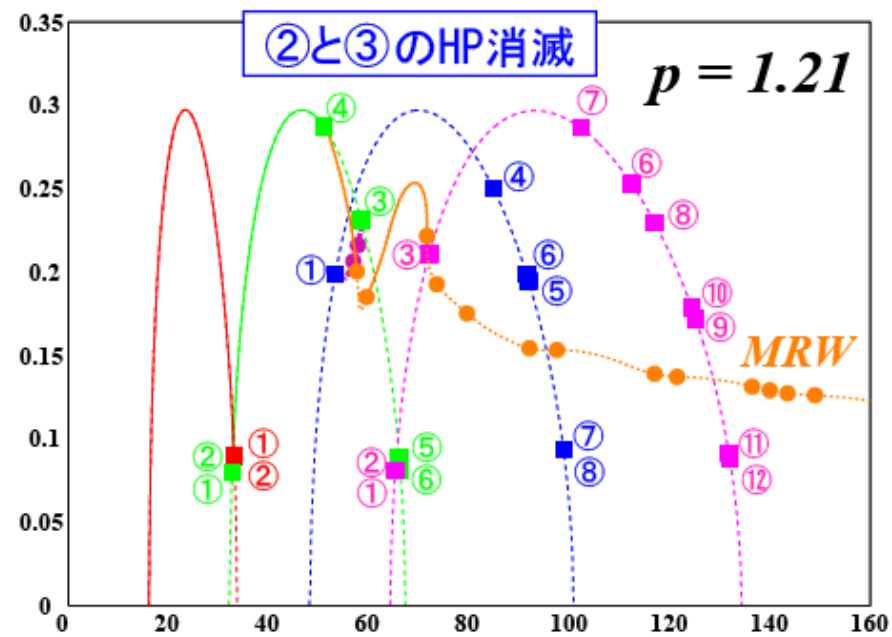
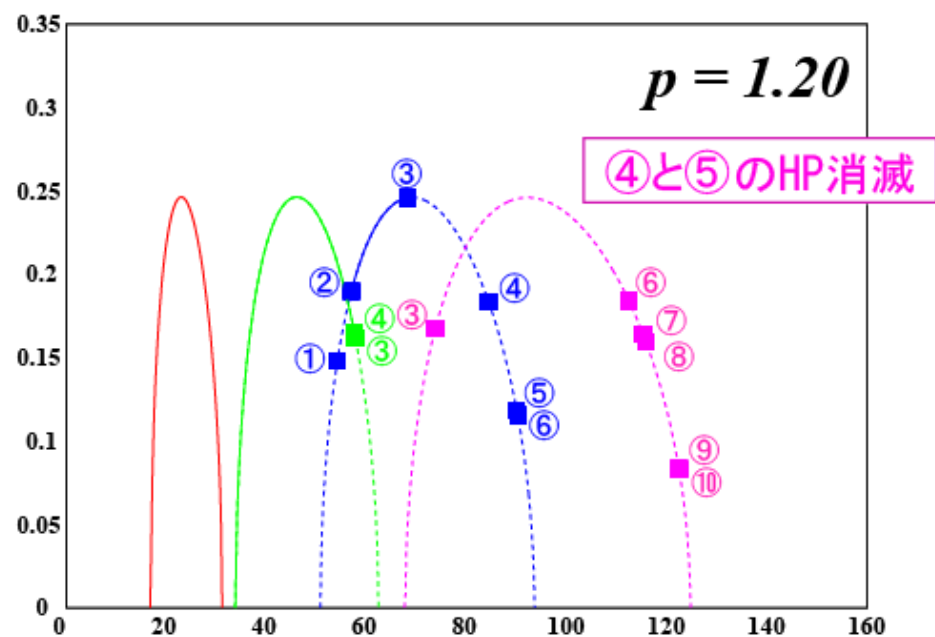
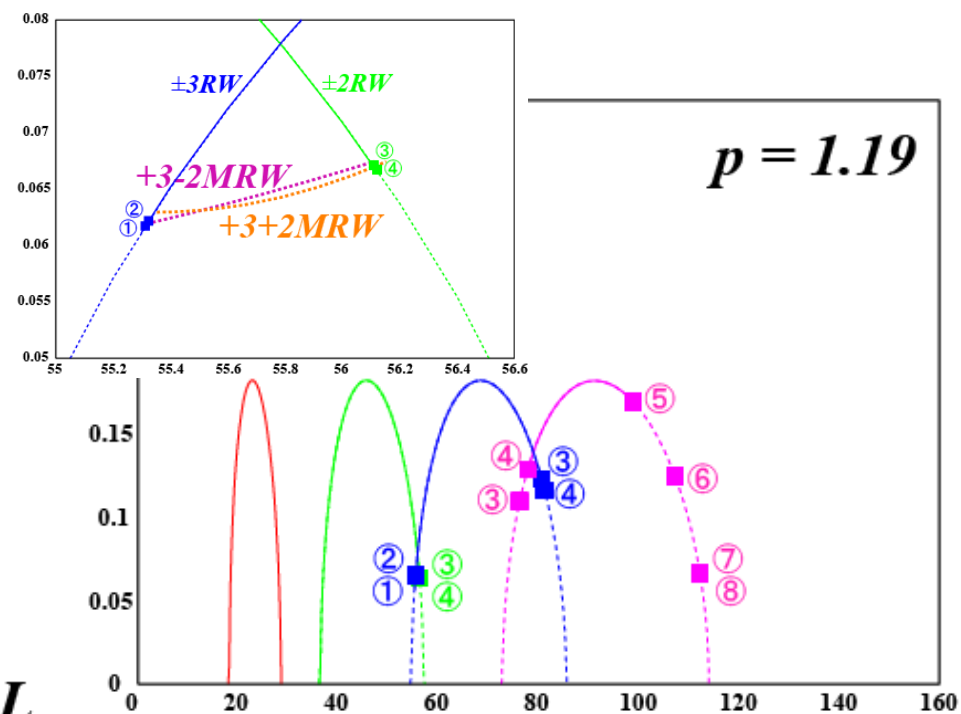
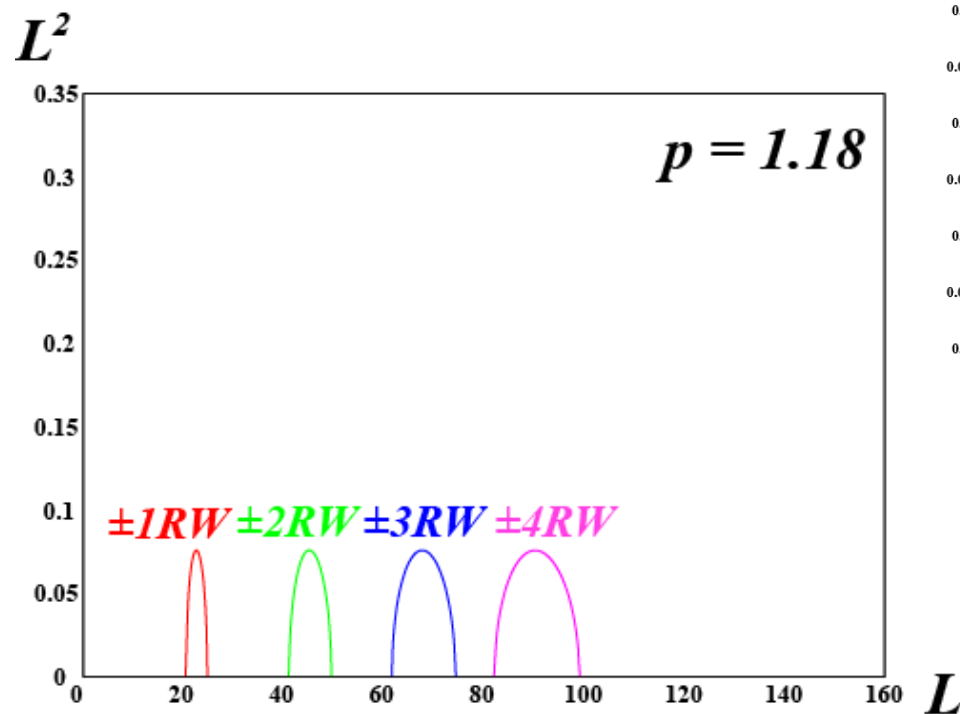
-2RW($L=40$)

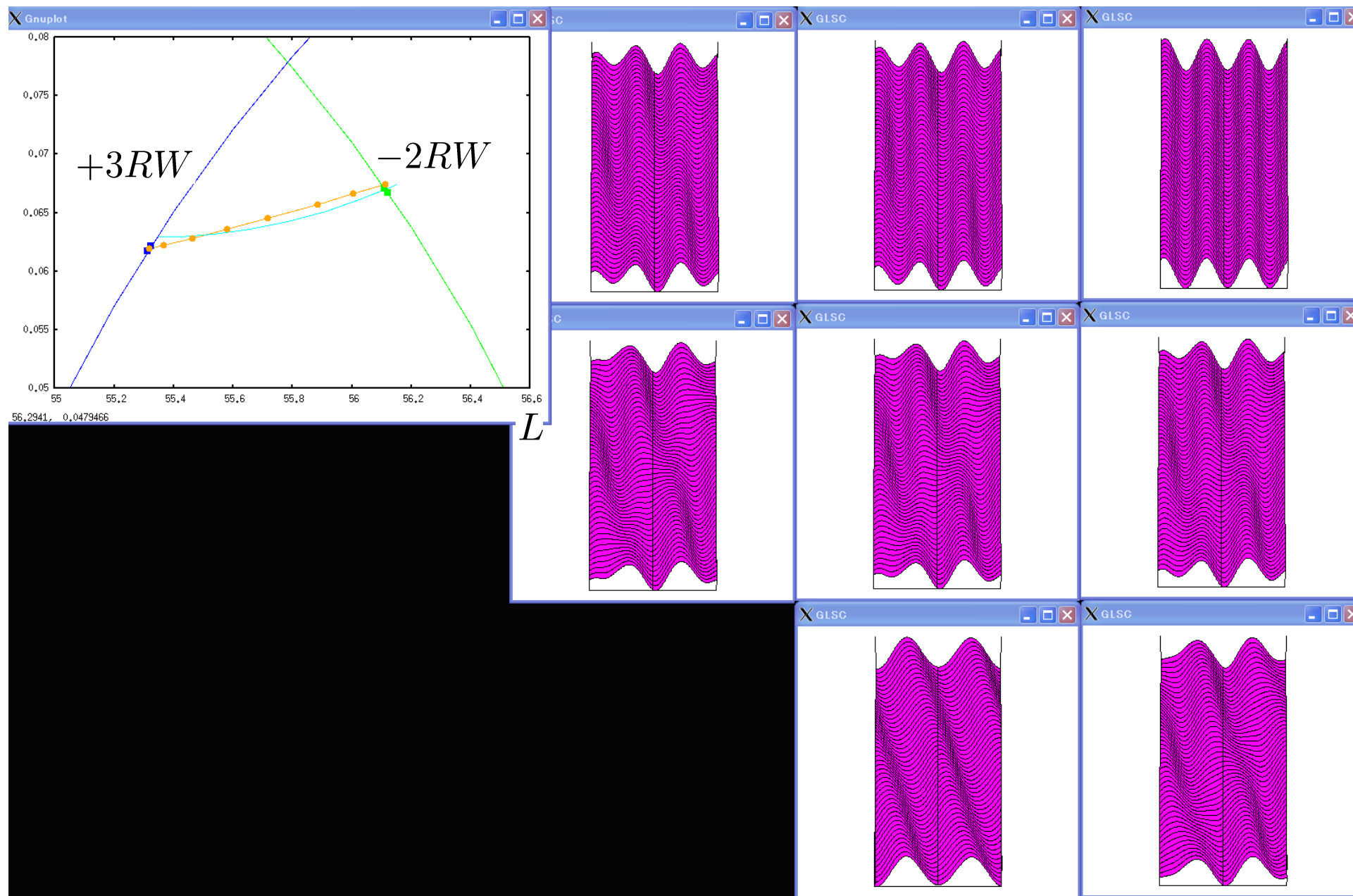


MRW($L=50$) $\cdots$ +2RWと+3RW

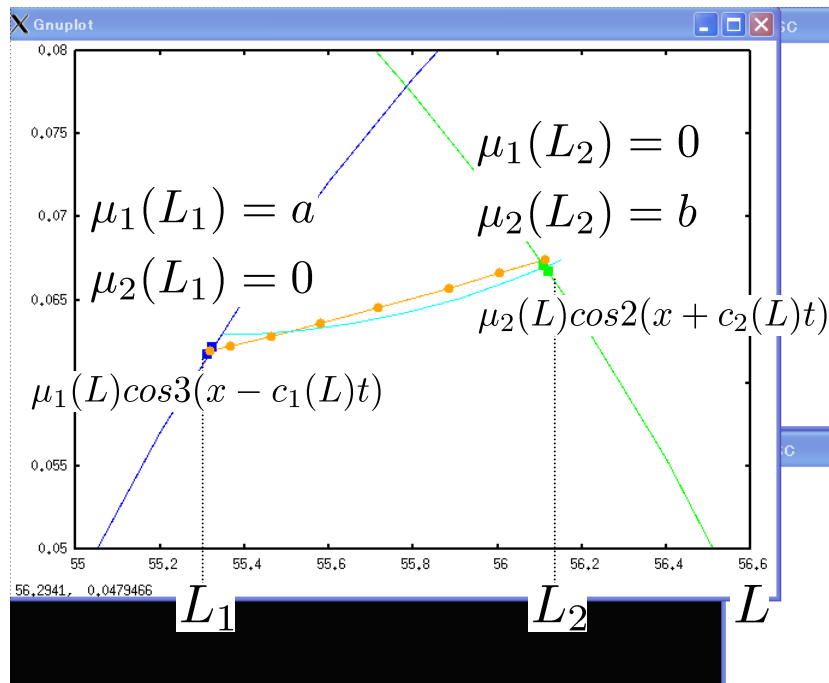


$$p = 1.21$$





MRWの数値計算法は脈動進行パルス波の数値計算法と同じ

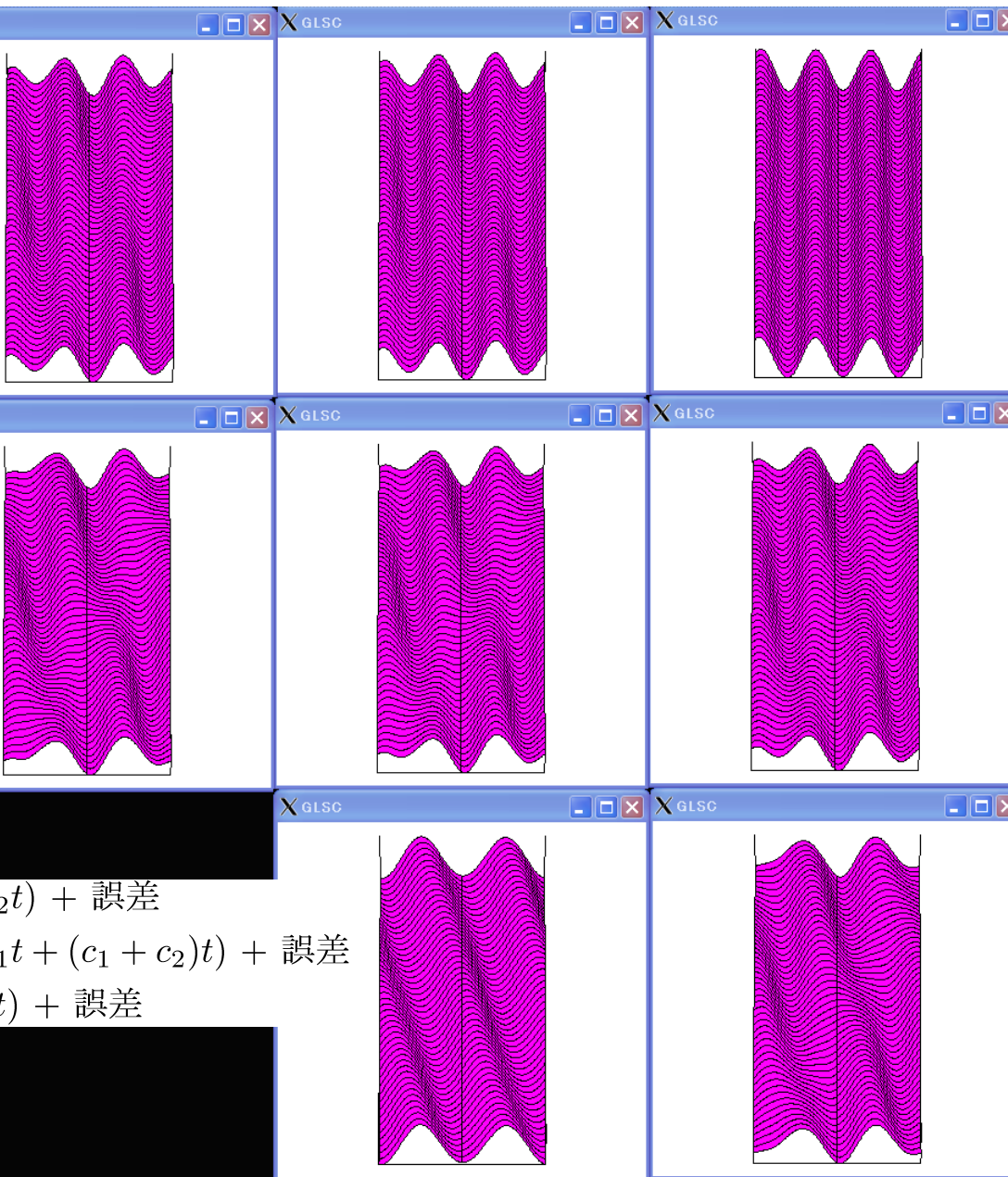


$c_1(L) \cdots + 3RW$ の速度の絶対値

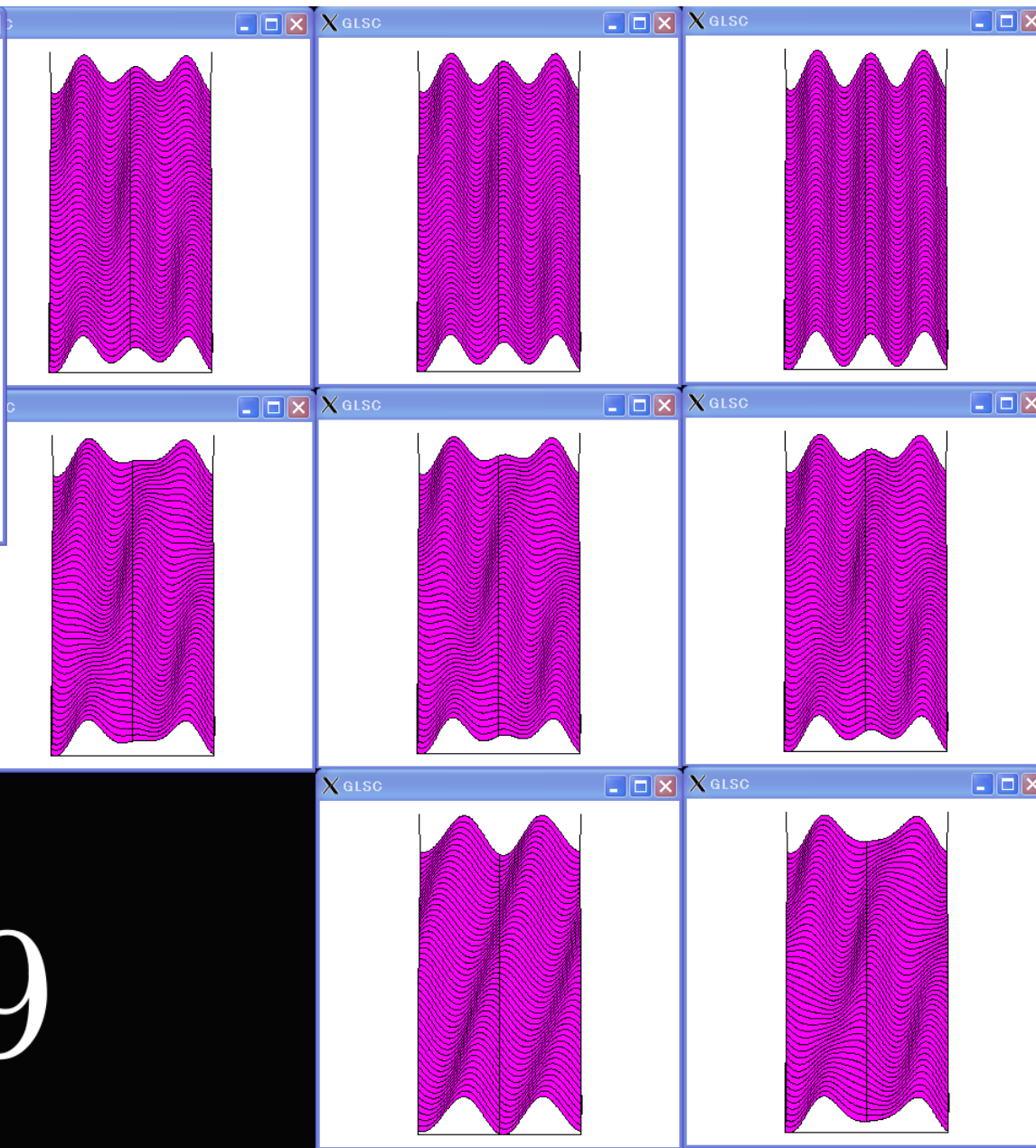
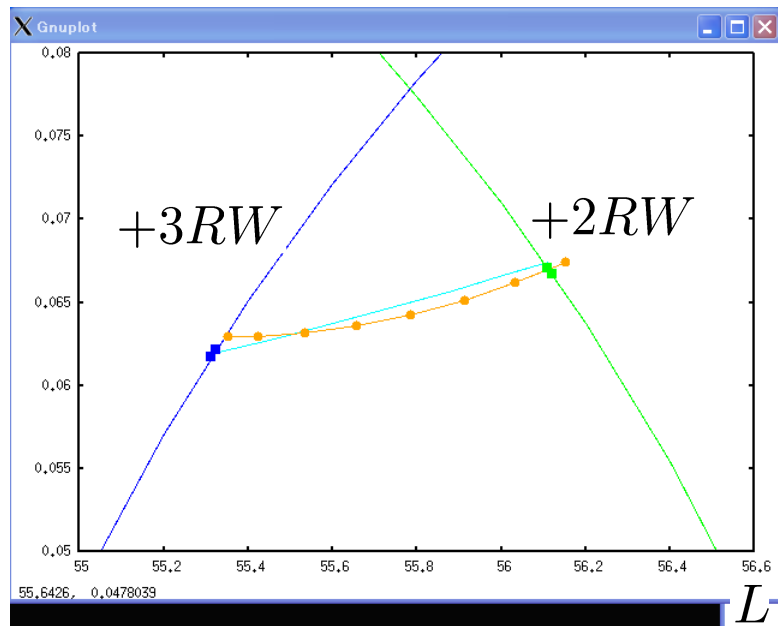
$c_2(L) \cdots - 2RW$ の速度の絶対値

$c_1 < c_2$

$$\begin{aligned}
 MRW &\approx \mu_1(L)\cos 3(x - c_1 t) + \mu_2(L)\cos 2(x + c_2 t) + \text{誤差} \\
 &= \mu_1(L)\cos 3(x - c_1 t) + \mu_2(L)\cos 2(x - c_1 t + (c_1 + c_2)t) + \text{誤差} \\
 &= \mu_1(L)\cos 3z + \mu_2(L)\cos 2(z + (c_1 + c_2)t) + \text{誤差}
 \end{aligned}$$



MRWの数値計算法は脈動進行パルス波の数値計算法と同じ



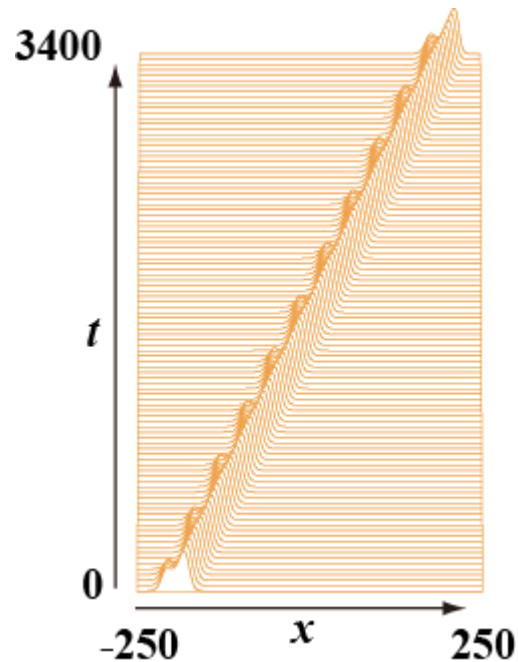
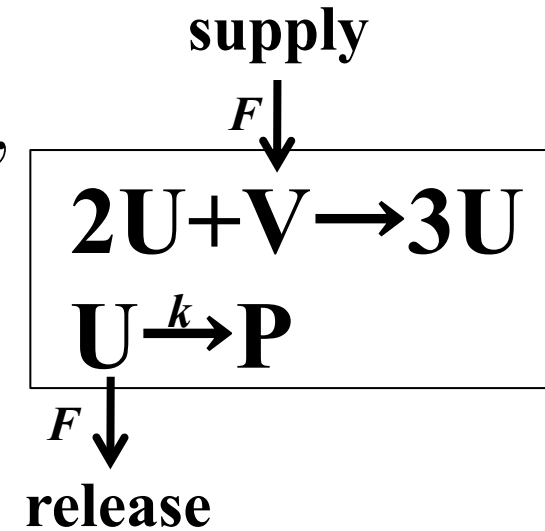
$p=1.19$

MRWの数値計算法は脈動進行パルス波の数値計算法と同じ

extended Gray-Scott モデル

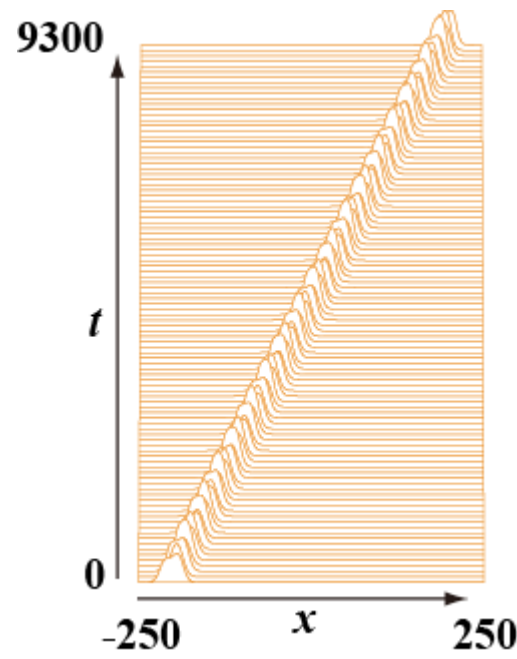
$$\begin{cases} u_t - u_{xx} = (-(F + k)u + u^2v)/\varepsilon, \\ v_t - dv_{xx} = F(1 - v) - u^2v \end{cases}$$

$F = 0.018 \quad k = 0.052$
(mono-stable excitability)



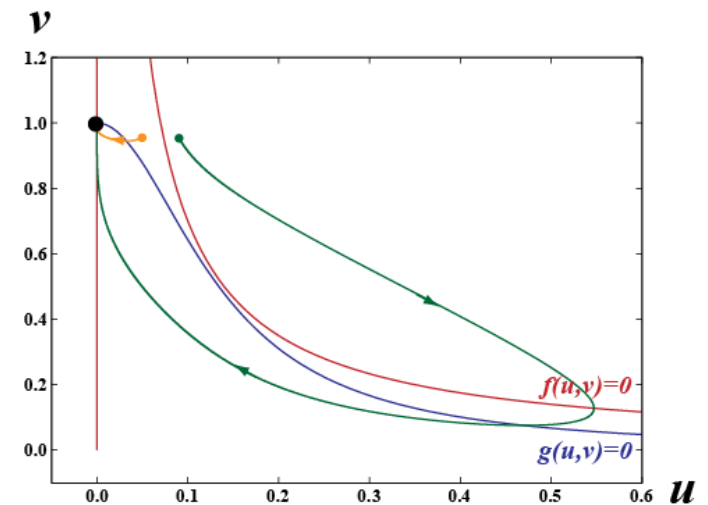
$d = 4.07$

TB(A)

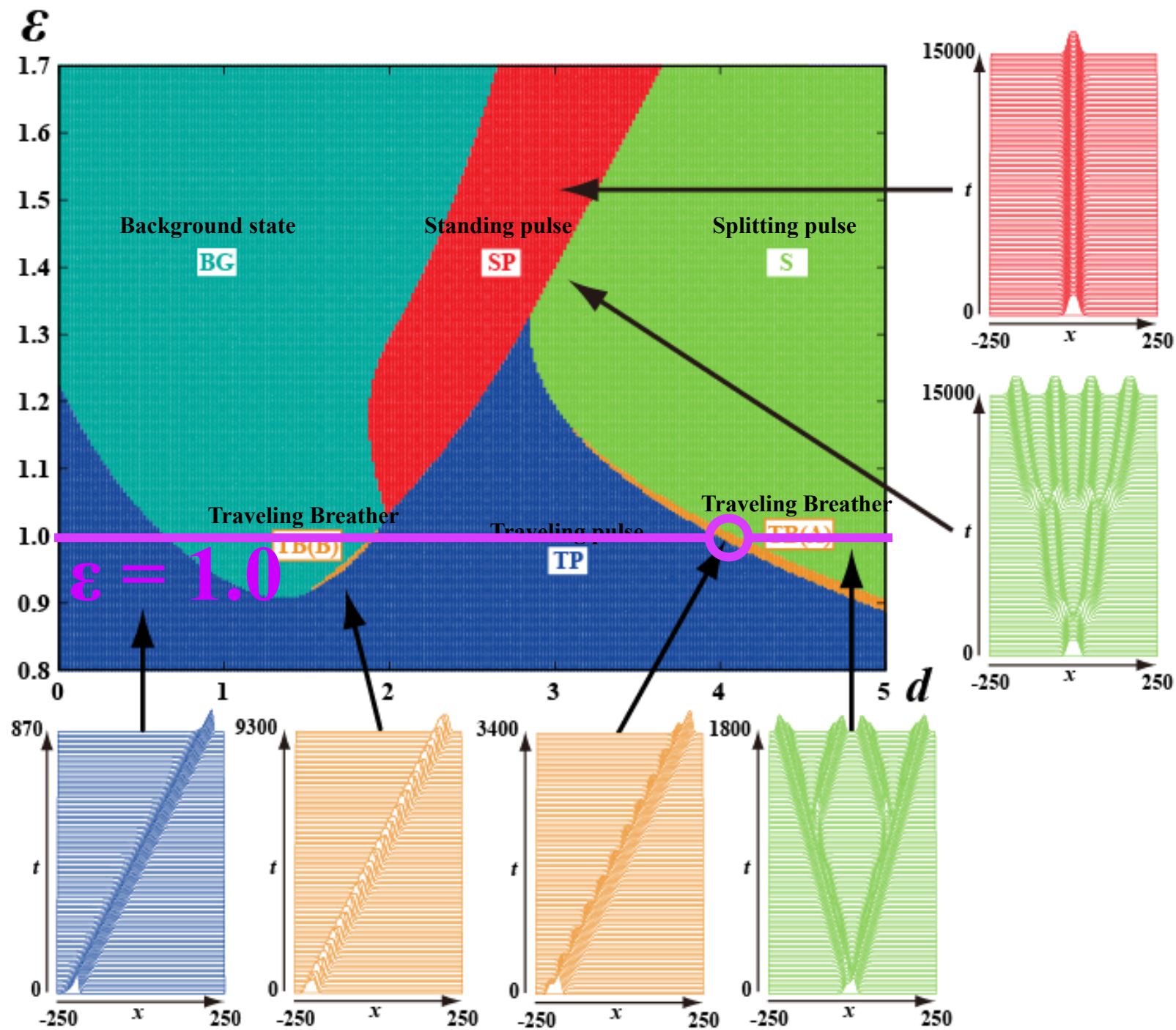


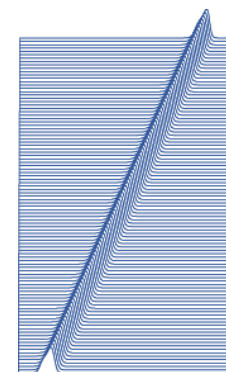
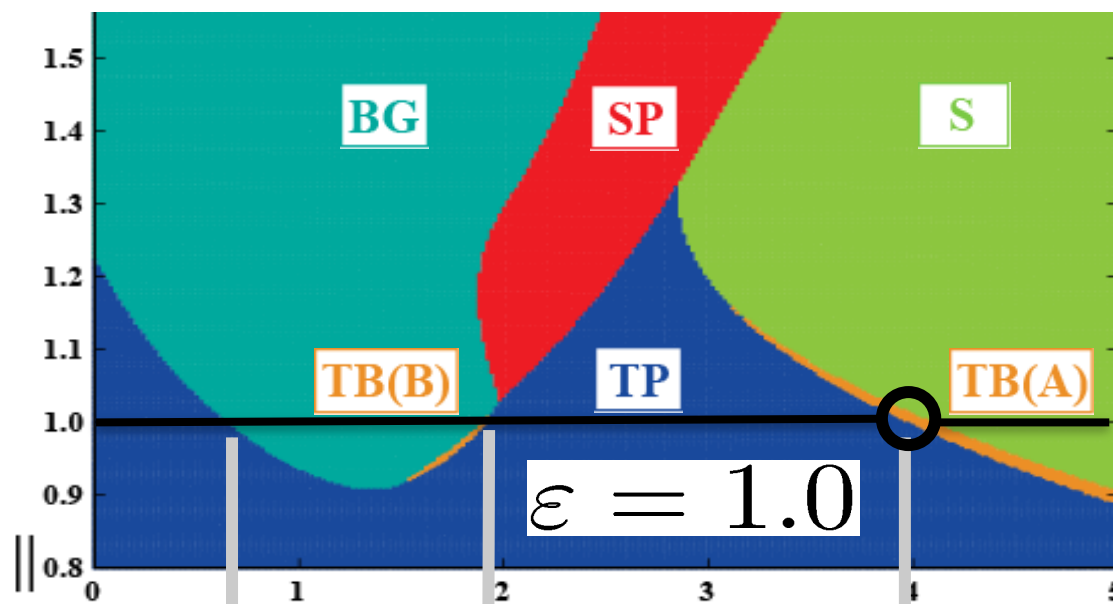
$d = 1.9$

TB(B)

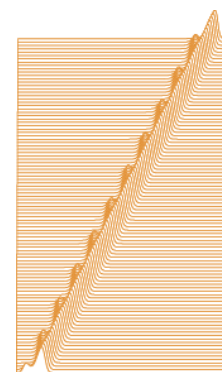


$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = -(F + k)u + u^2v = f(u, v), \\ \frac{dv}{dt} = F(1 - v) - u^2v = g(u, v) \end{cases}$$

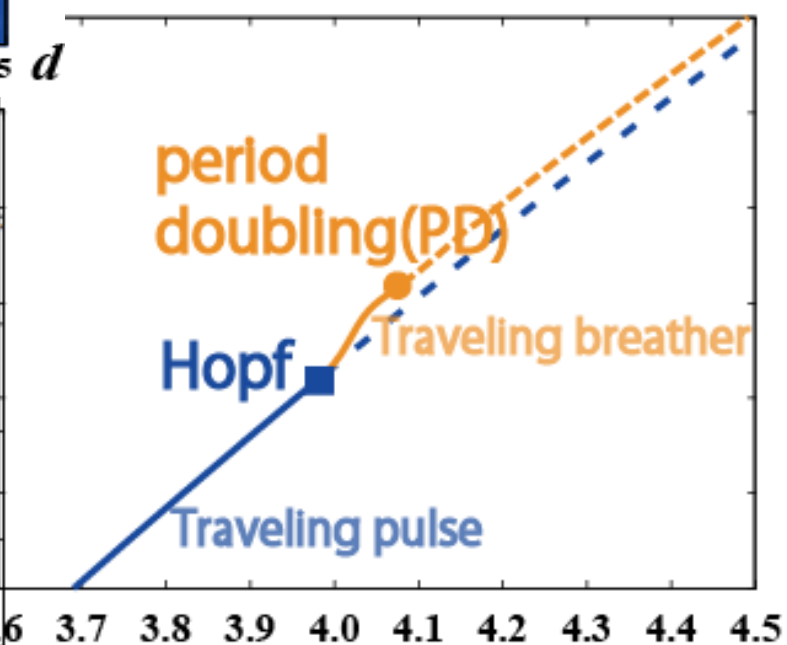
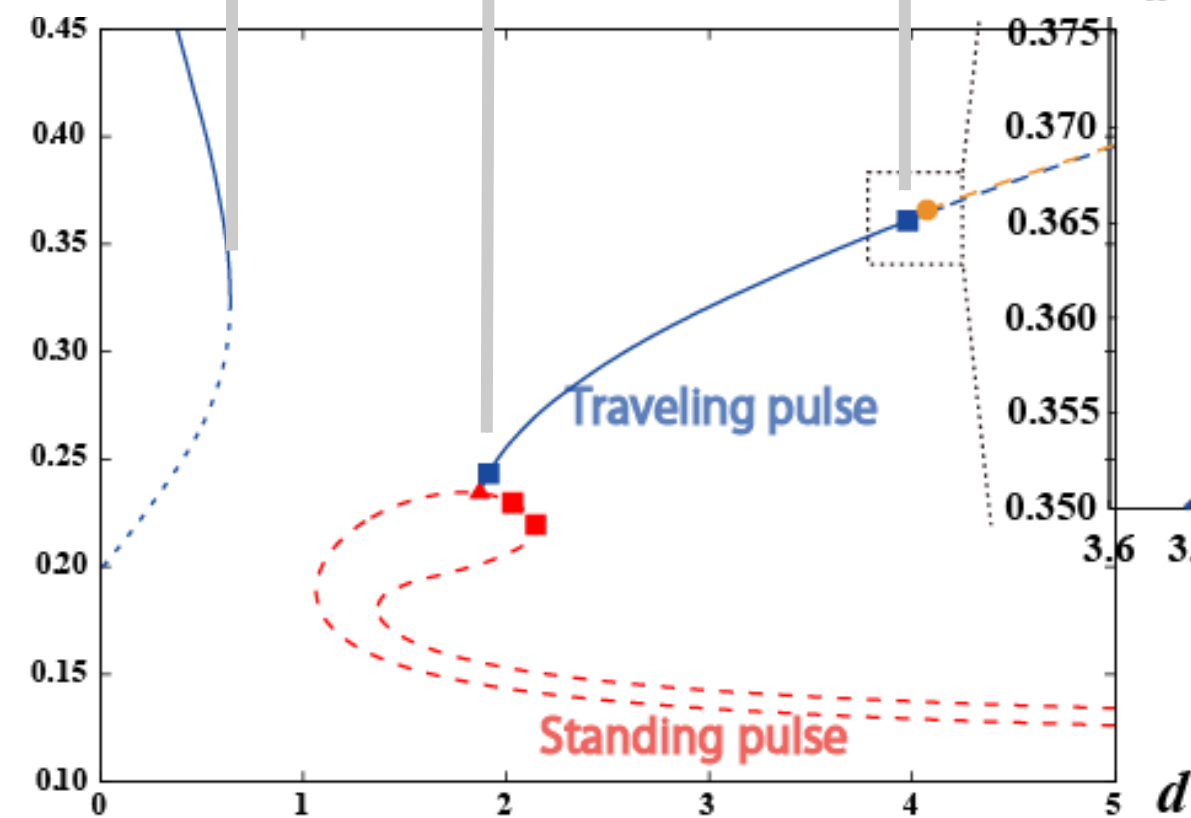




TP

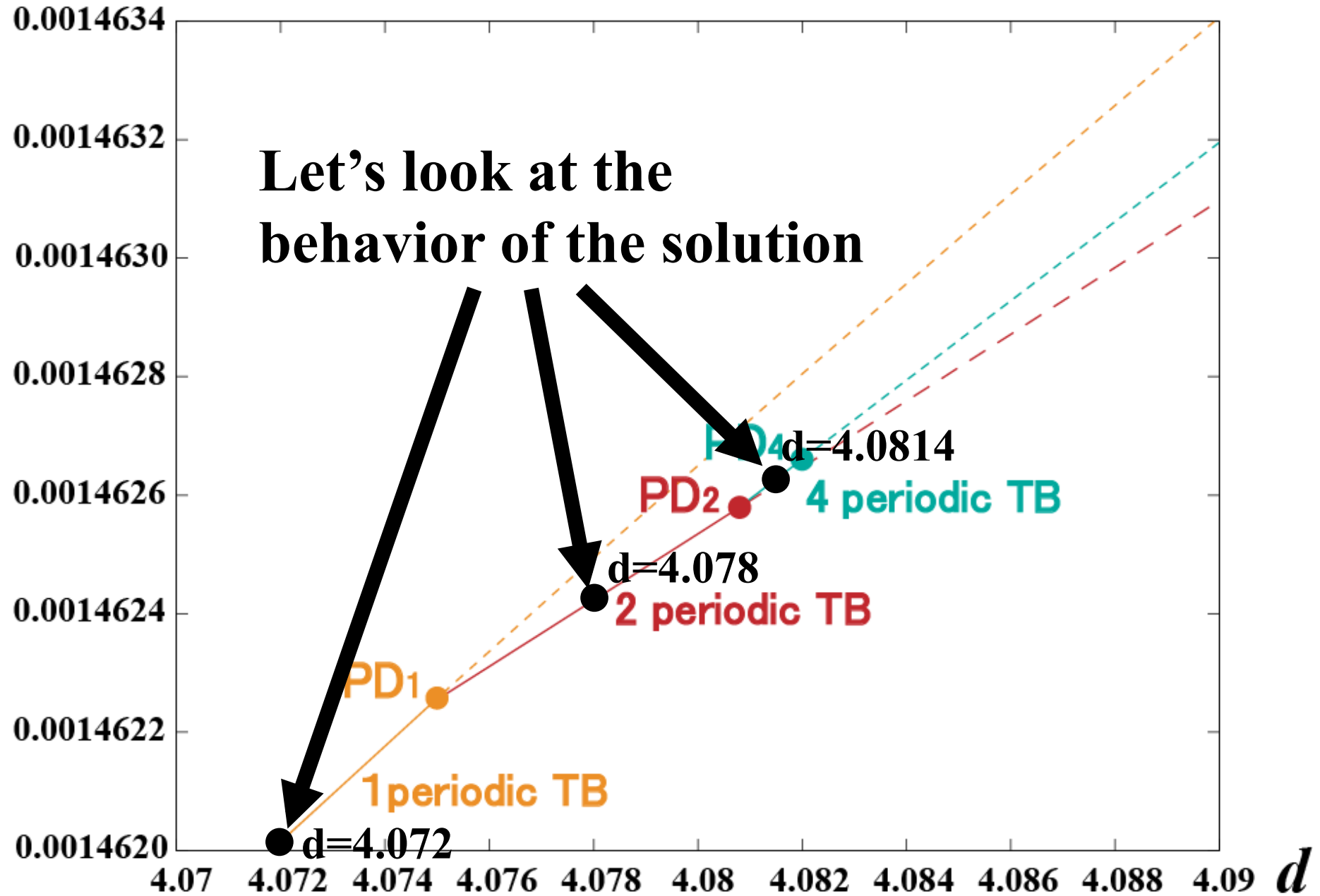


TB(A)

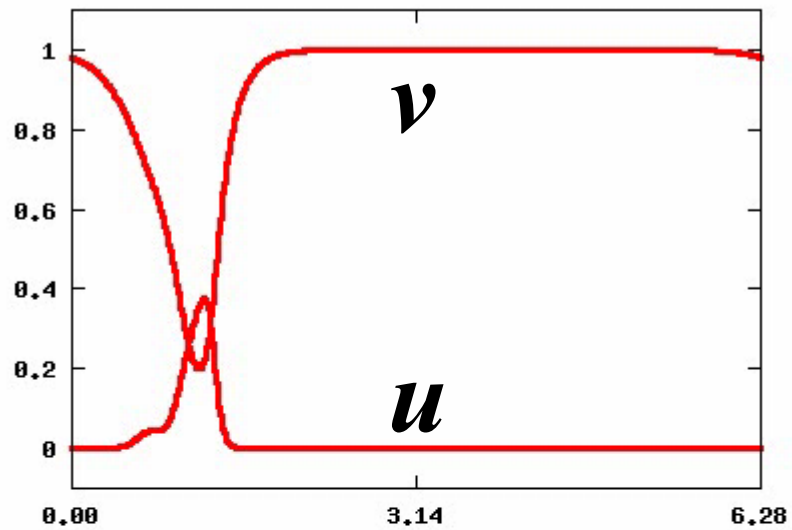


bifurcation diagram
for $\varepsilon = 1.0$

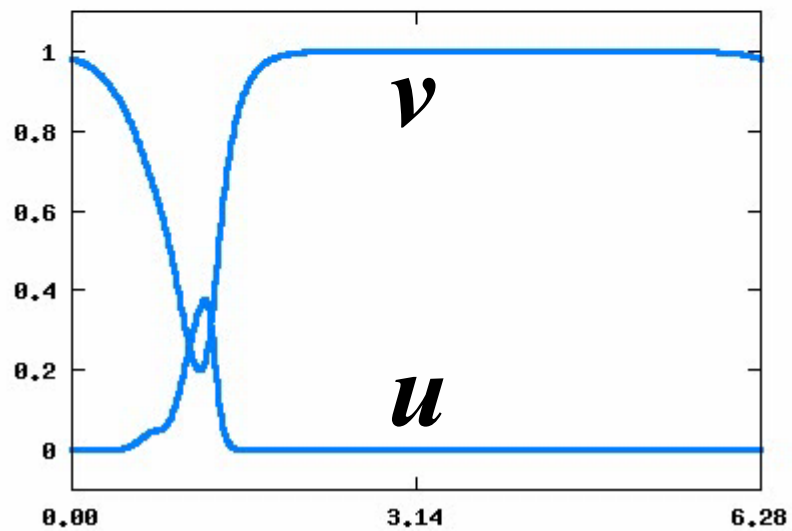
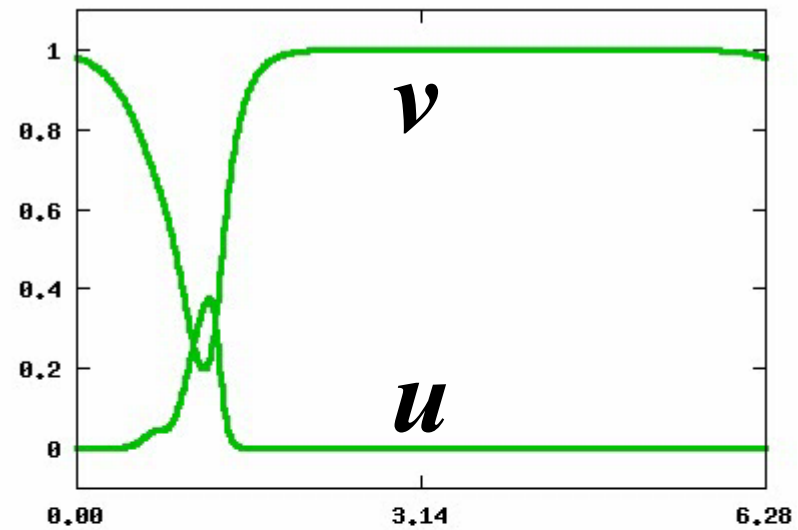
velocity



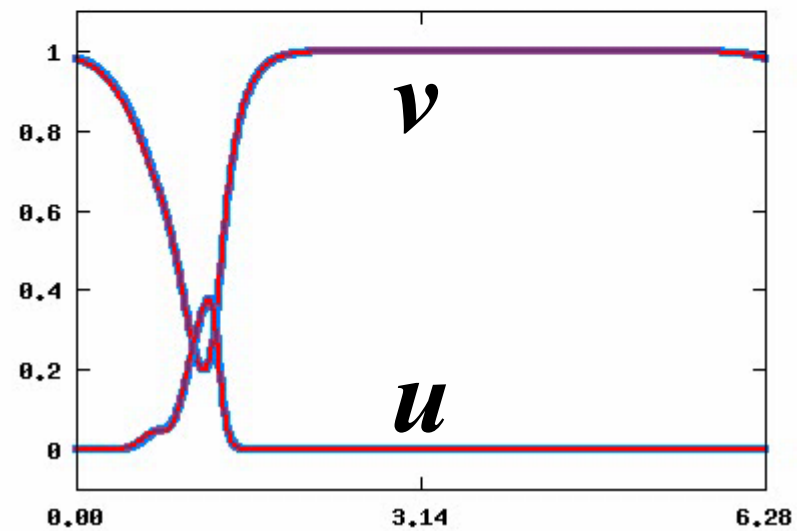
1 period(d=4.072)



2 period(d=4.078)



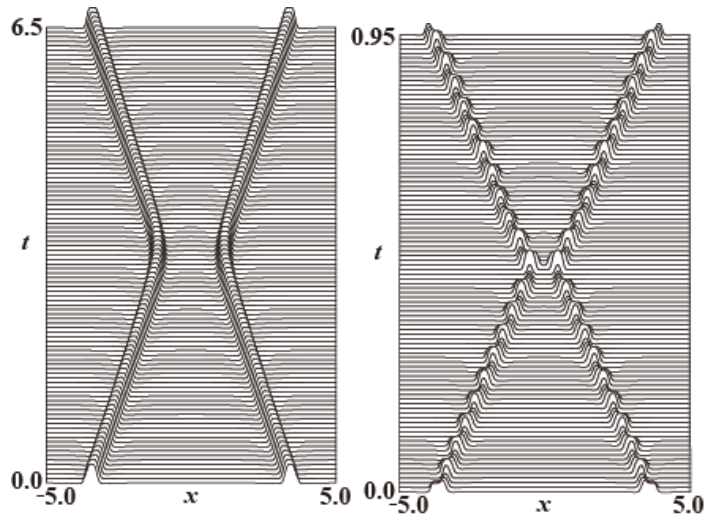
4 period(d=4.0814)



1 period and 4period

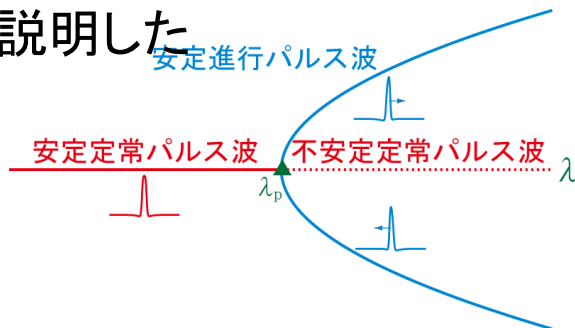
反心拡散系に現れるハルスタインミニ ス

反射現象

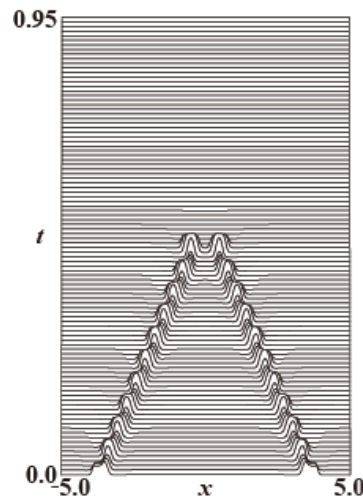


栄・三村・長山

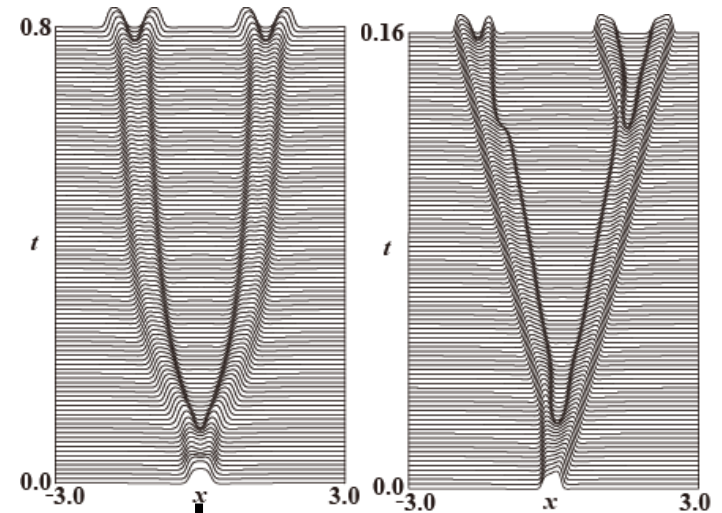
⇒定常パルス波の分岐構造(ピッチ
フォーク分岐点)から進行パルス波の反
射現象を説明した



消滅現象

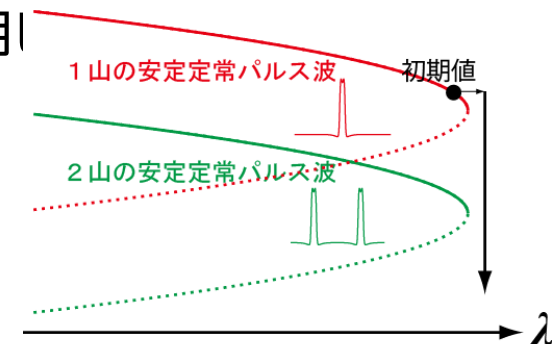


分裂現象

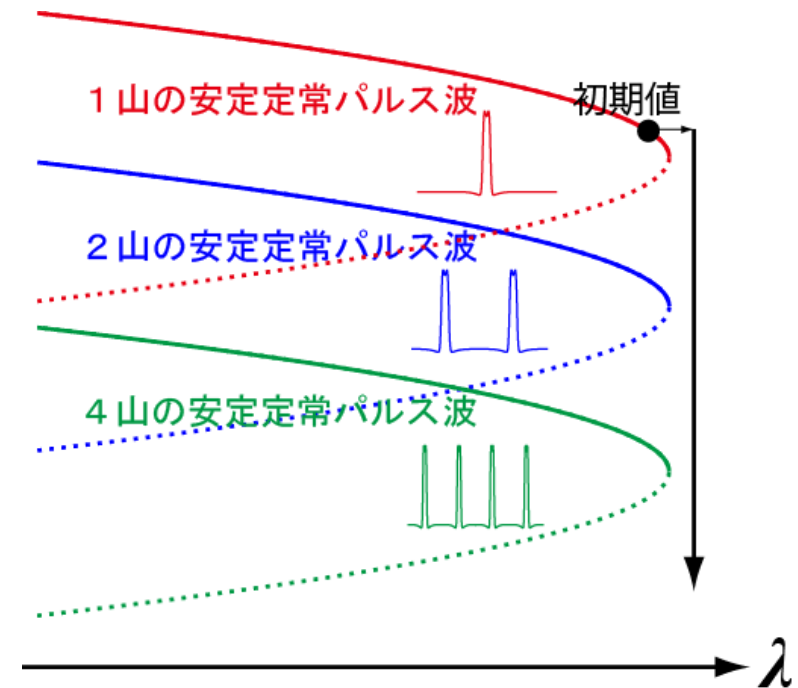
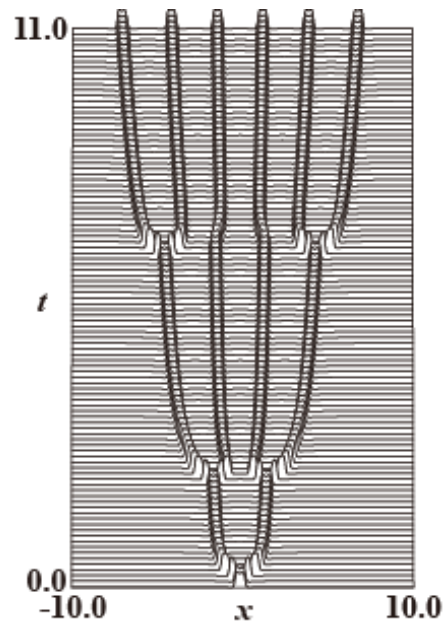
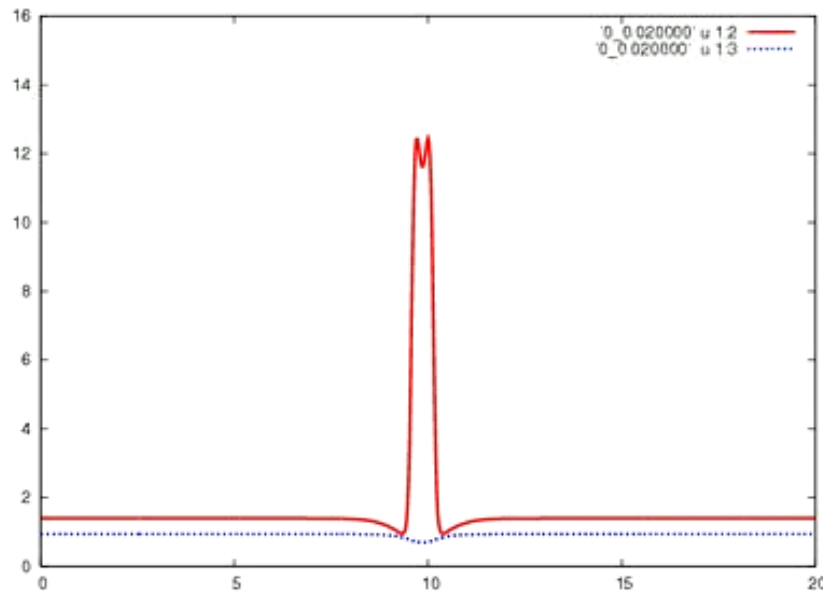


上山・西浦

⇒定常パルス波の分岐構造(サドル・
ノード分岐点)から定常パルス波の分裂
現象を説明!



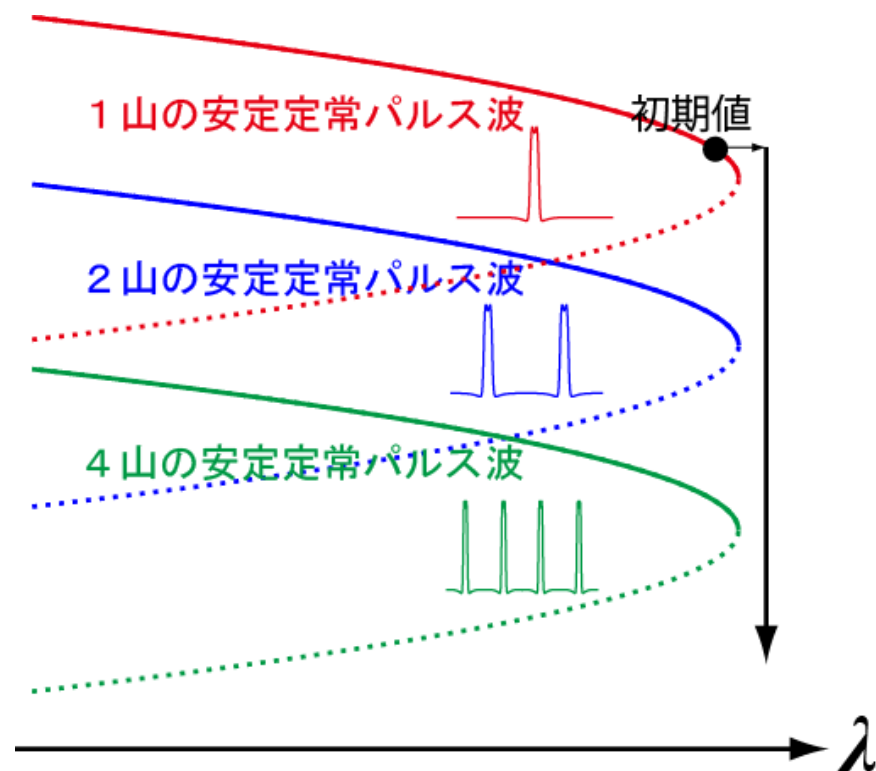
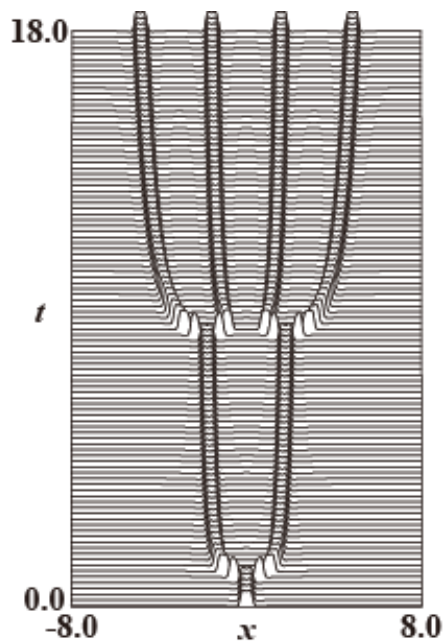
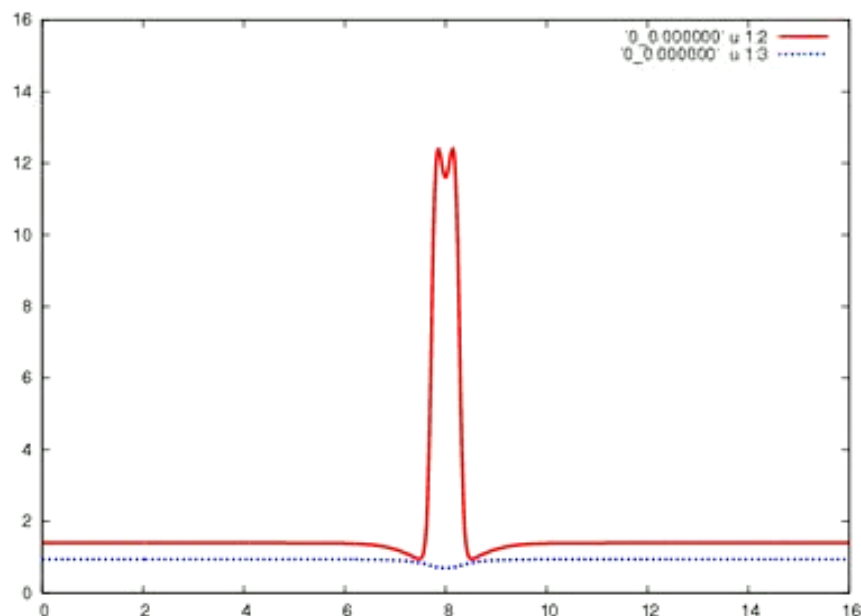
定常パルス波の分裂現象



上山・西浦

⇒ 定常パルス波の分岐構造 (サドル・ノード分岐点) から定常パルス波の分裂現象を説明した

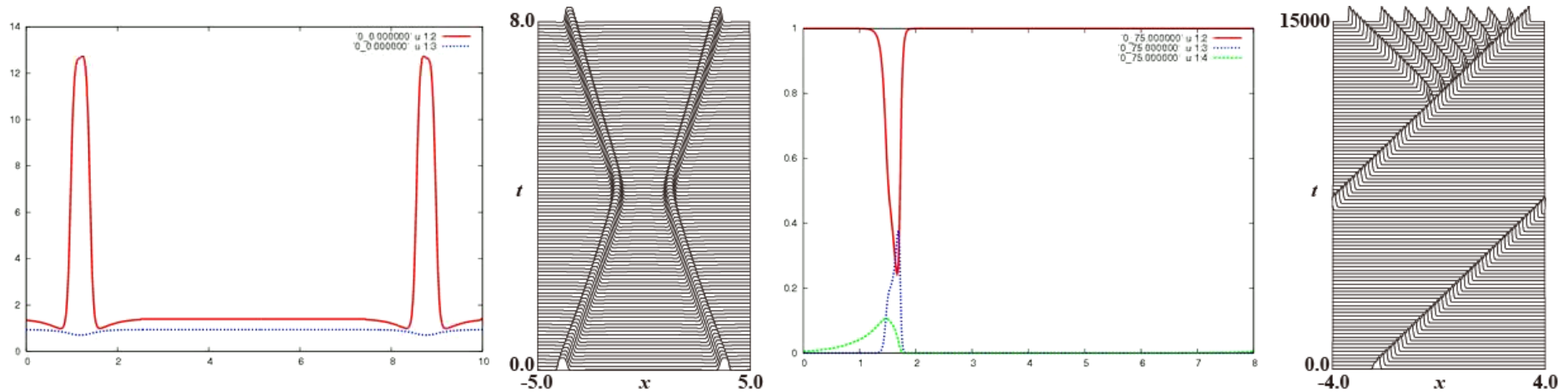
定常パルス波の分裂現象



上山・西浦

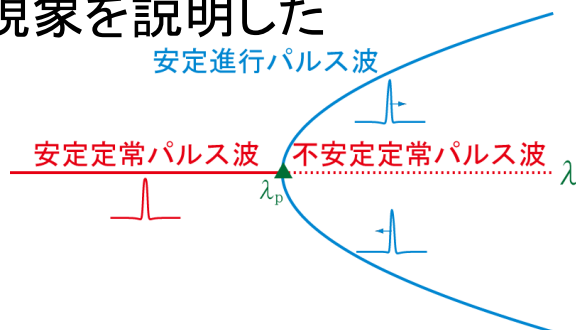
⇒定常パルス波の分岐構造(サドル・ノード分岐点)から定常パルス波の分裂現象を説明した

進行パルス波の反射現象と分裂現象

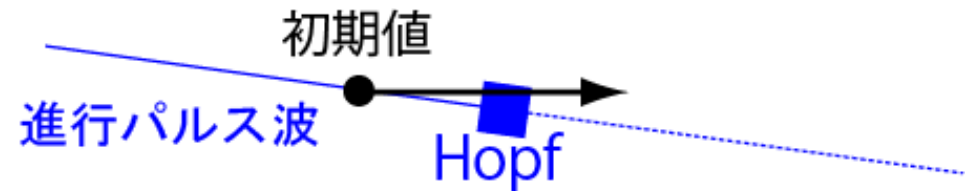


栄・三村・長山

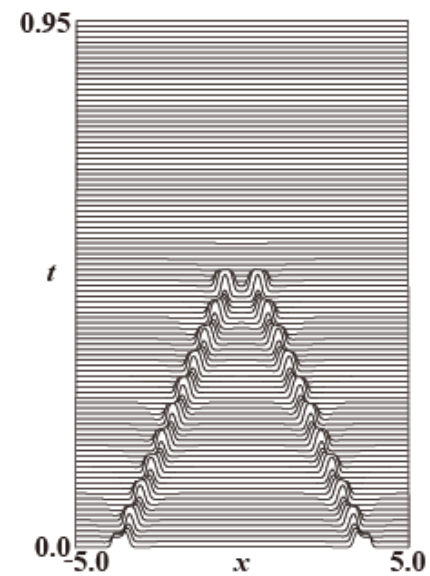
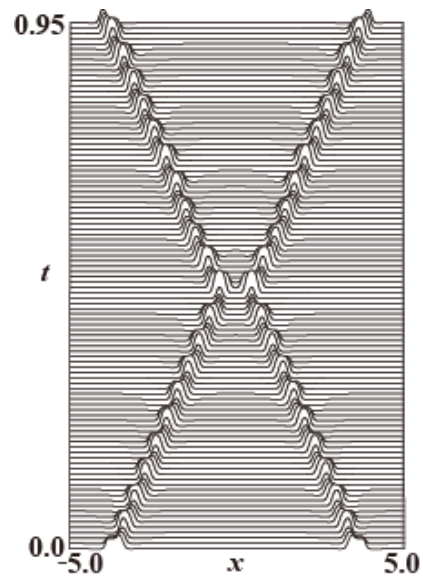
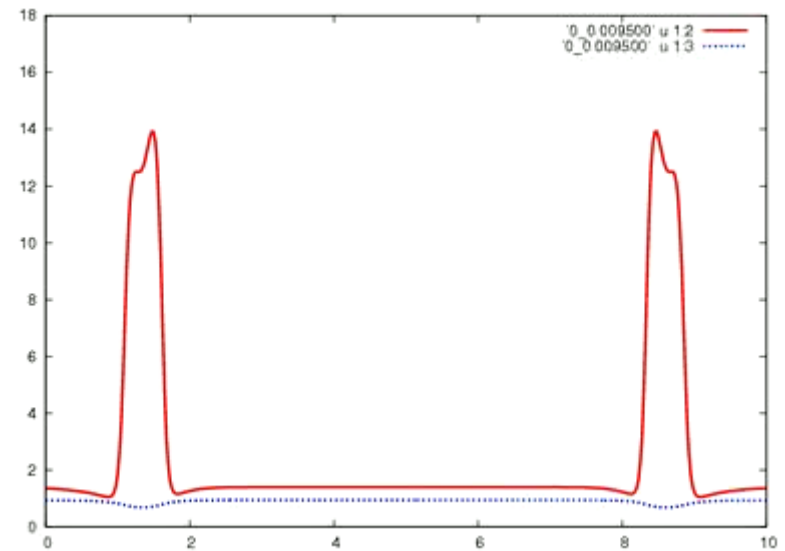
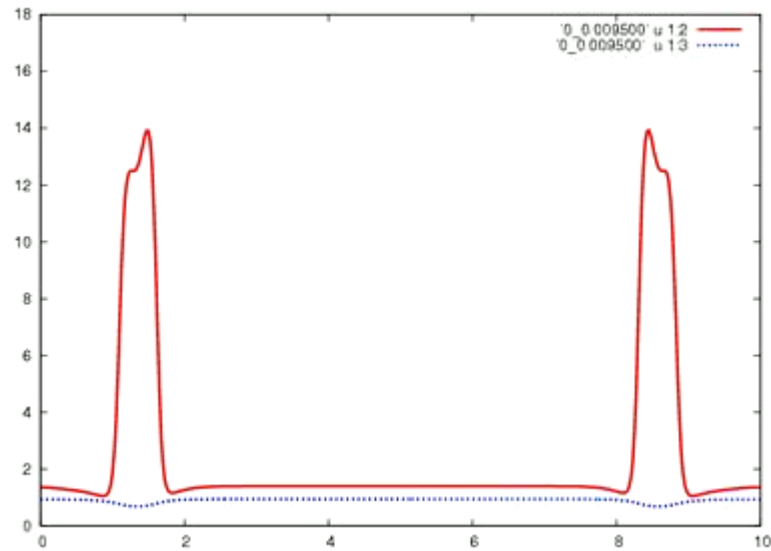
⇒ 定常パルス波の分岐構造 (ピッチフォーク分岐点) から進行パルス波の反射現象を説明した



進行パルス波のHopf分岐による分裂現象



脈動進行パルス波に現れる反射現象と消滅現象



パルス波のダイナミクスを理解するには 大域的分岐構造 が役に立つだろう！！

AUTO

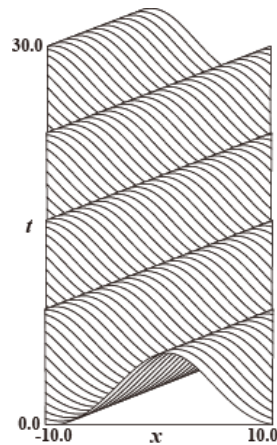
⇒常微分方程式の解の大域的分岐構造を数値的に求めるソフトウェア

- ・システムサイズ(ODEの次元数)が小さい場合 強力
- ・システムサイズ(ODEの次元数)が大きい場合 数値計算が困難(計算量が多い)

目的

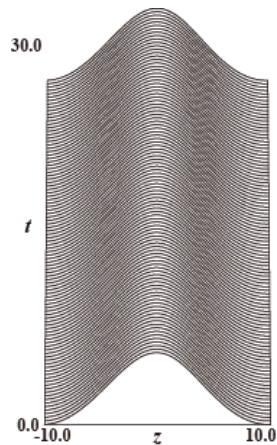
1. システムサイズの大きい系に対して大域的分岐構造を求めるソフトウェアを開発していこう.
2. 開発したソフトウェアを用いてパルスダイナミクスの解明.

RWとフロント波の数値計算法

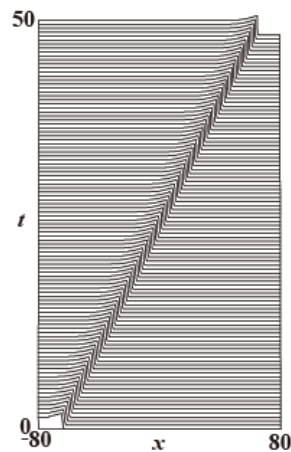


$$z = x - ct$$

c は速度

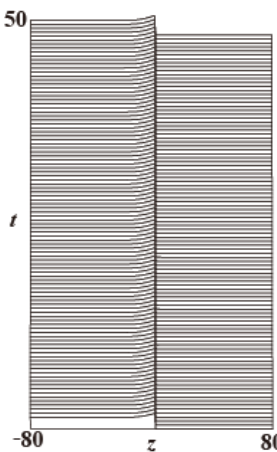


進行パルス波の
数値計算法と同じ手法



$$z = x - ct$$

c は速度



$$\begin{cases} DU_{zz} + cU_z + F(U) = 0, \\ \int_{-L}^L \bar{U}'(z) \cdot U(z) dz = 0, \\ U_z(-L) = 0, \quad U_z(L) = 0 \end{cases}$$

ノイマン境界条件

例1 2変数発熱反応拡散系

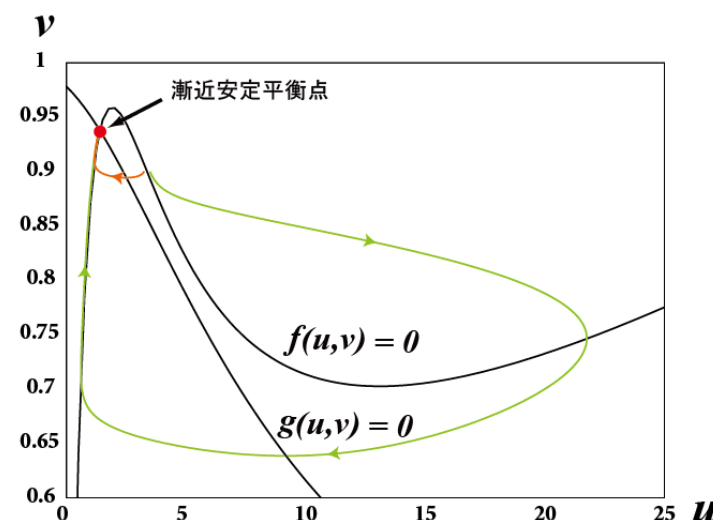
$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{1}{\varepsilon} \left(-a u + \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \right), \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + h(1 - v) - \exp \left(\frac{u}{1 + u/c} \right) v \end{cases}$$

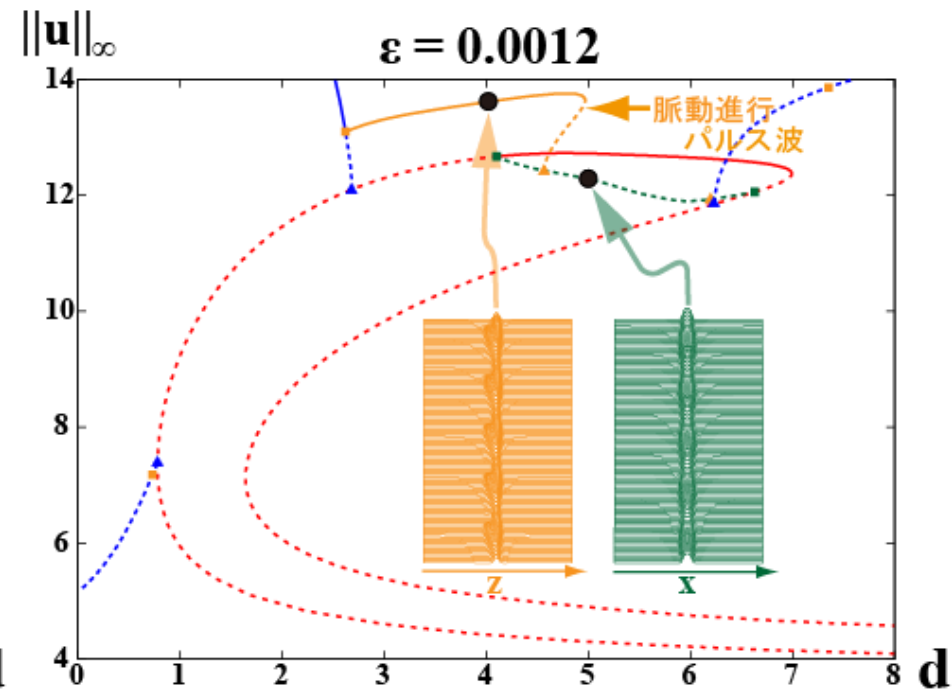
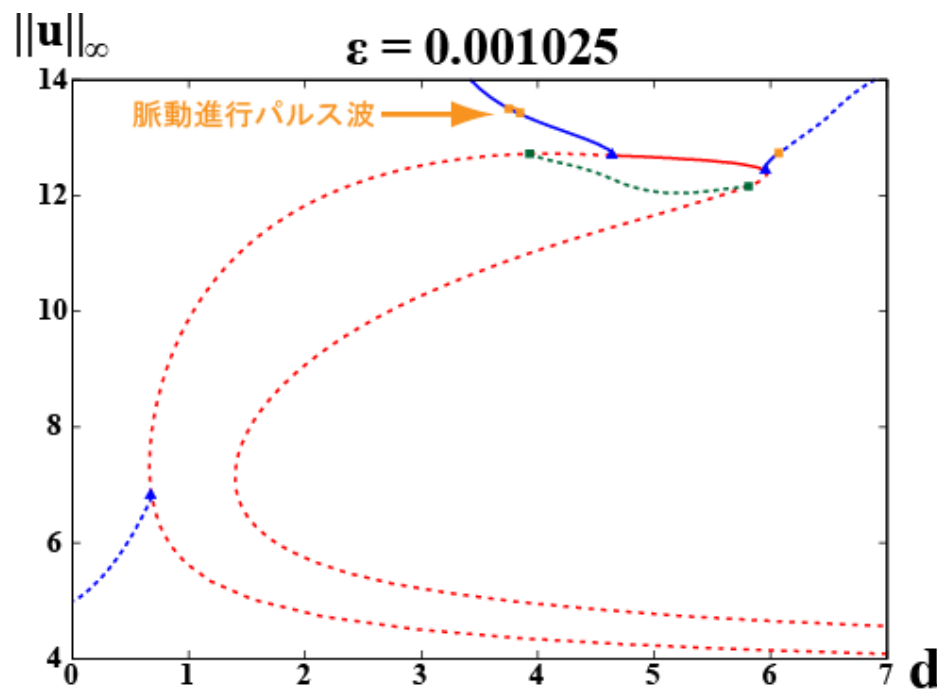
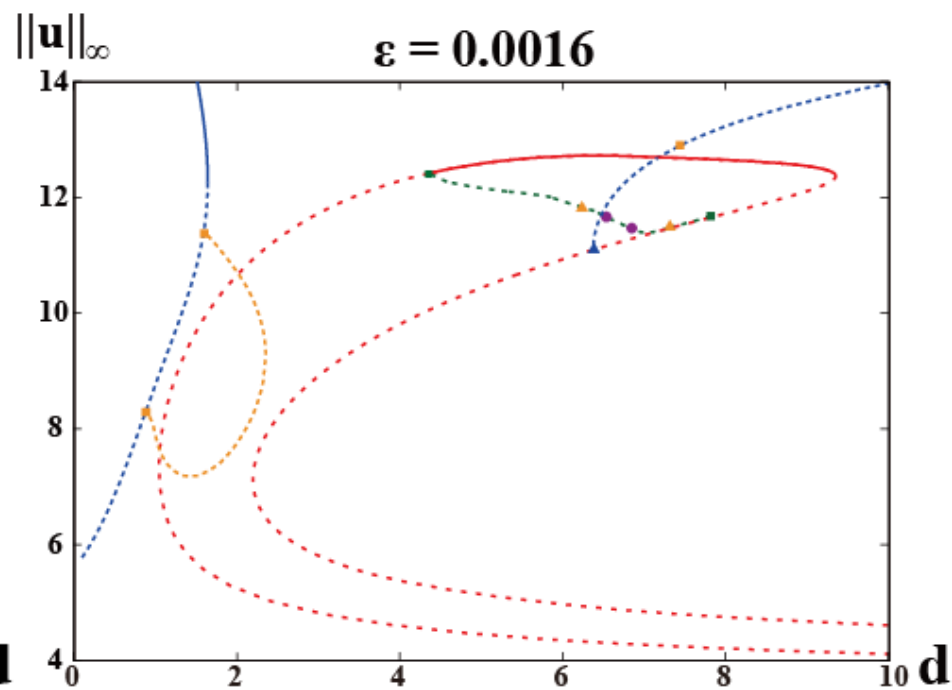
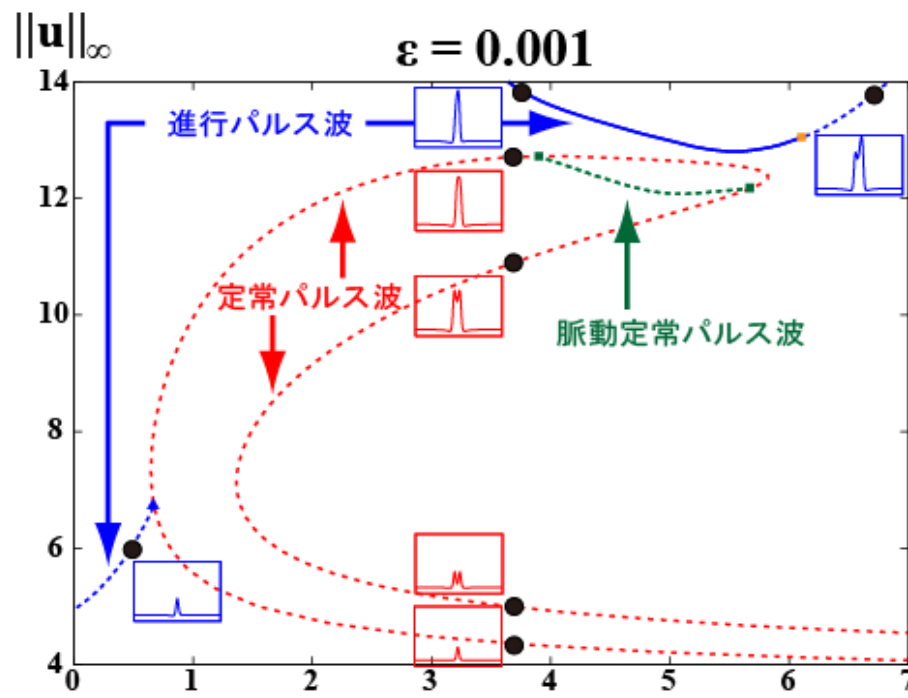
に対し, 周期境界条件

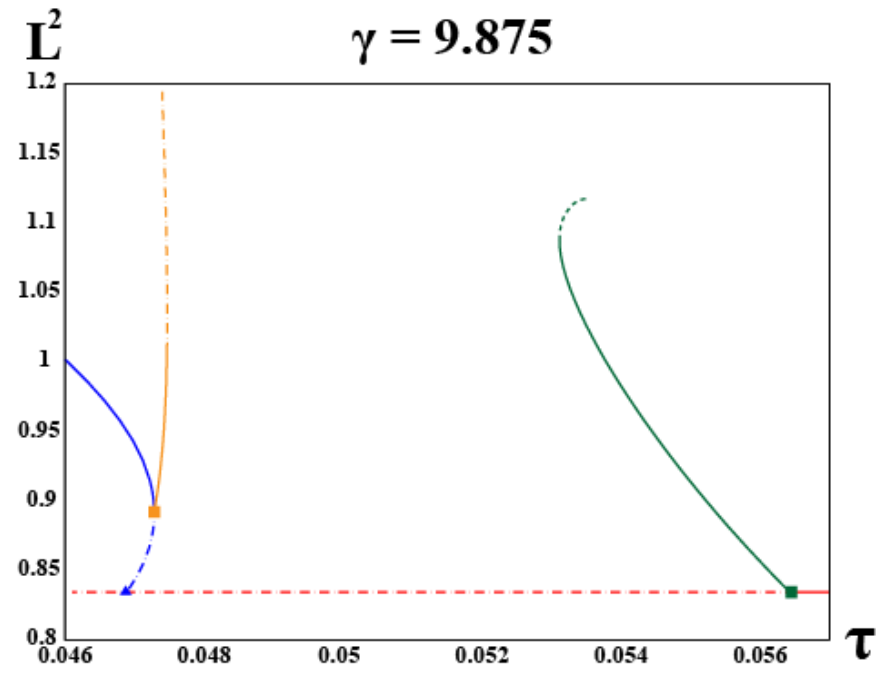
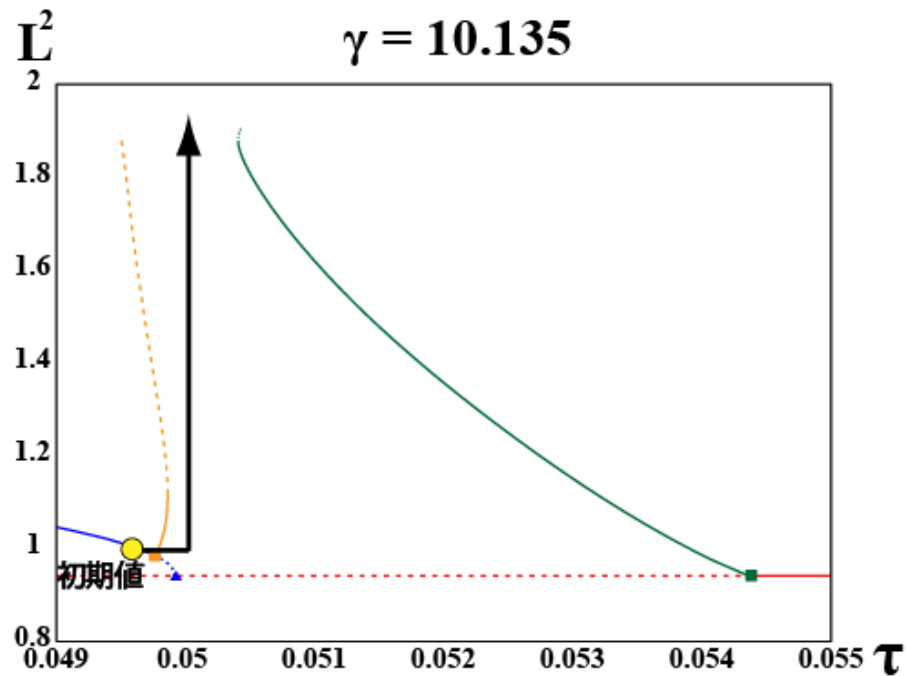
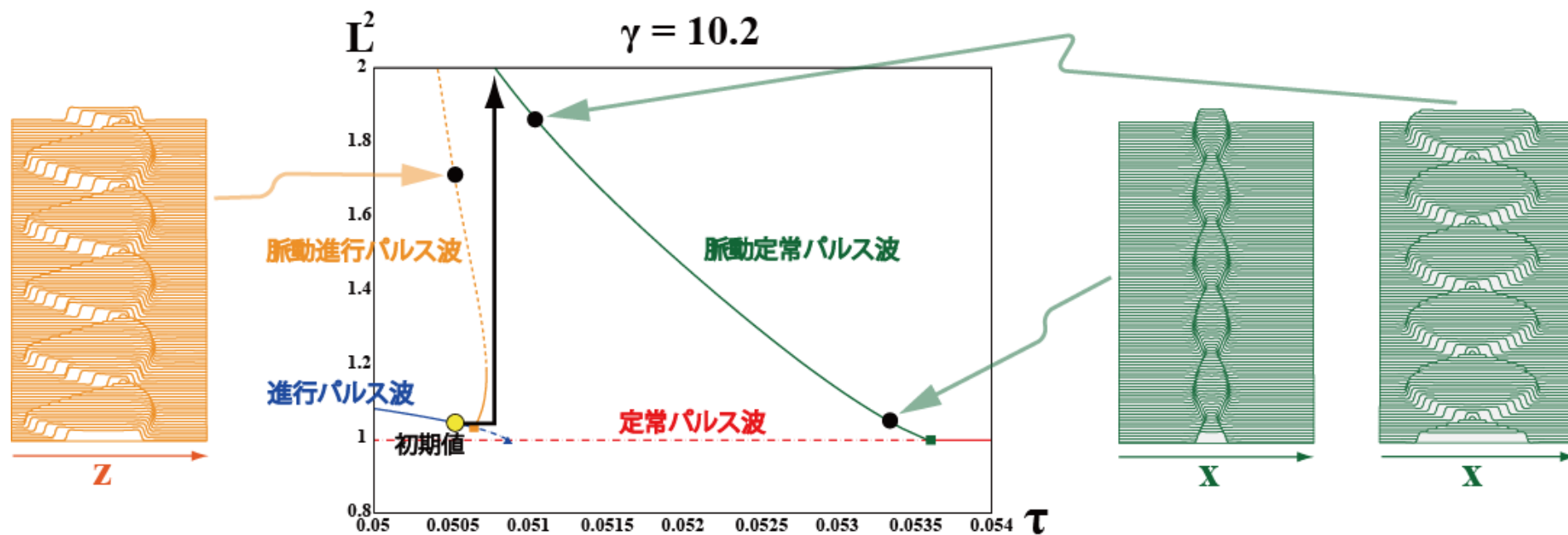
$$\begin{cases} (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \\ (u_x, v_x)(t, -L) = (u_x, v_x)(t, L) \end{cases}$$

を与えて大域的分岐構造を調べる.

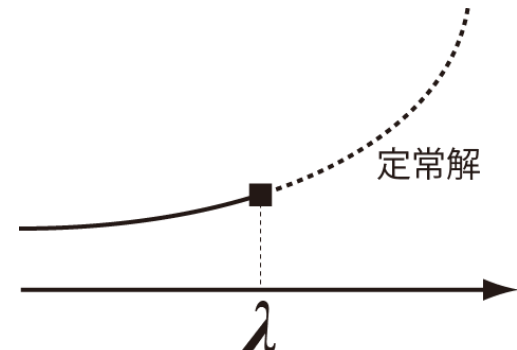
パラメータは $a = 2.0$, $c = 5.0$, $h = 45.0$ と選び
(単安定興奮性発熱反応拡散系), d と ε はコ
ントロールパラメータで正の値とする.







反応拡散系に現れる定常解のホップ分岐点を求める方法

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H} = D\mathbf{U}_{zz} + c\mathbf{U}_z + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \\ P = \int_{-L}^L \bar{\mathbf{U}}'(z) \cdot \mathbf{U}(z) dz = 0, \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{U}}(\alpha + i\beta) - iw(\alpha + i\beta) = \mathbf{0}, \\ (\alpha + i\beta) \cdot (\tilde{\alpha} + i\tilde{\beta}) - 1 = 0. \end{array} \right.$$


ここで, iw はホップ分岐点 λ における固有値, $\alpha + i\beta$ はその固有関数, $\tilde{\alpha} + i\tilde{\beta}$ は $\alpha + i\beta$ に近い固有関数.

ニュートン法を適用

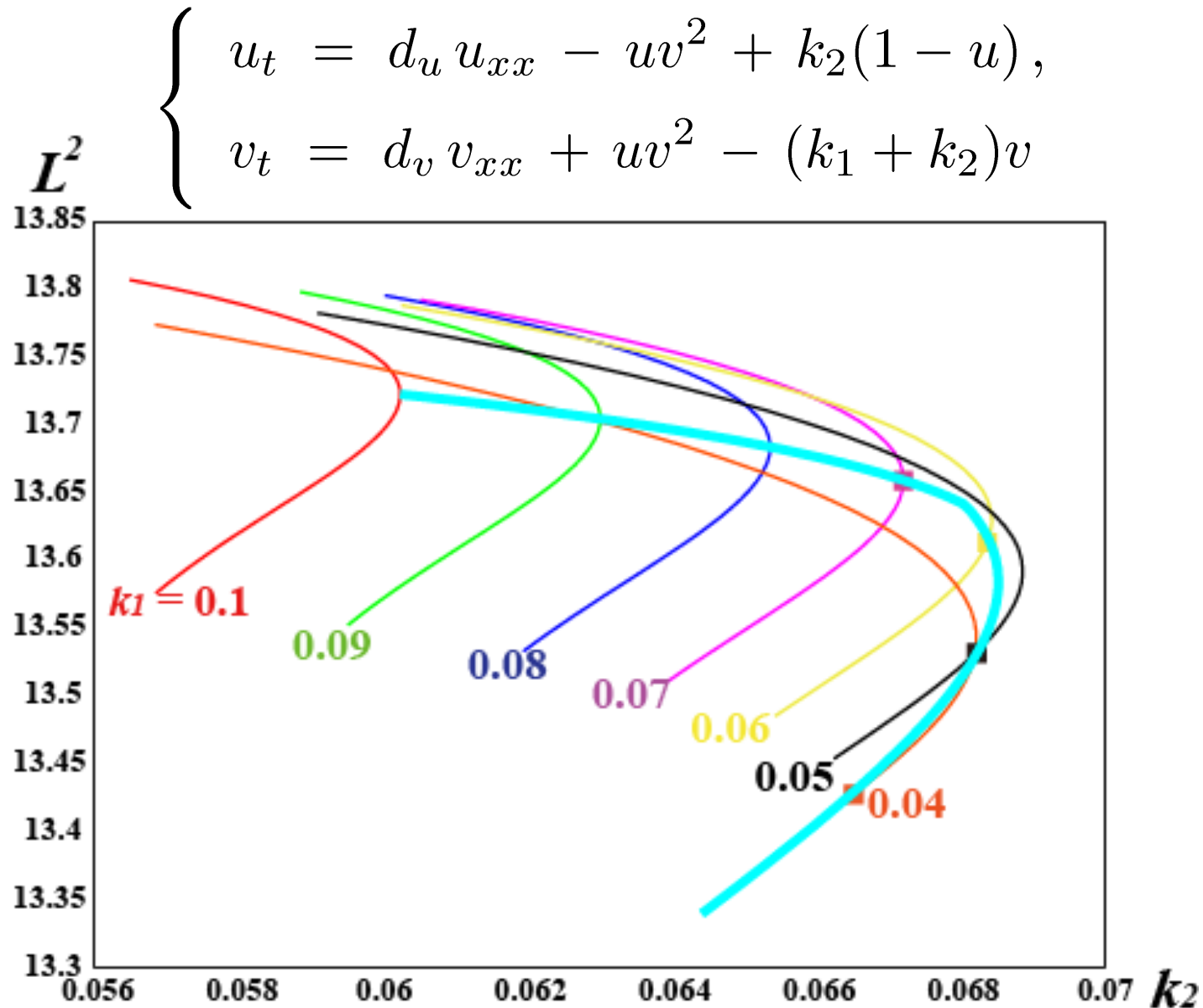
未知数 $(\mathbf{U}, \alpha, \beta, w, c, \lambda)$

n 変数の反応拡散系に対し空間を N 分割する場合

$3nN + 3$ 次元連立 1 次方程式を解くことになる

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}} & 0 & 0 & 0 & \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \lambda} & \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial c} \\ \bar{\mathbf{u}} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}^2} \alpha & \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial c \partial \mathbf{u}} \alpha & \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}} & w\mathbf{I} & \beta & \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial \lambda \partial \mathbf{u}} \alpha \\ -\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}^2} \beta & \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial c \partial \mathbf{u}} \beta & w\mathbf{I} & -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}} & \alpha & -\frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial \lambda \partial \mathbf{u}} \beta \\ 0 & 0 & \tilde{\alpha}^T & \tilde{\beta}^T & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\beta}^T & -\tilde{\alpha}^T & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta c \\ \Delta \alpha \\ \Delta \beta \\ \Delta w \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H} \\ P \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}} \alpha + w\beta \\ \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}} \beta - w\alpha \\ \langle \alpha, \tilde{\alpha} \rangle + \langle \beta, \tilde{\beta} \rangle - 1 \\ \langle \alpha, \tilde{\beta} \rangle - \langle \beta, \tilde{\alpha} \rangle \end{pmatrix}$$

例) 2変数Gray-Scottモデルに現れる
定常パルス波のホップ分岐点を追跡



例3 Gray-Scottモデルを拡張した3変数反応拡散系

$$\left\{ \begin{array}{l} u_t = d_u u_{xx} - \frac{uv^2}{1+k_3w} + k_2(1-u), \\ \tau v_t = d_v v_{xx} + \frac{uv^2}{1+k_3w} - (k(x) + k_2)v, \\ \theta w_t = d_w w_{xx} + k_4(v-w), \\ k(x) = k_1 + \varepsilon \left(\frac{1}{1+e^{-\gamma(x+\frac{d}{2})}} + \frac{1}{1+e^{\gamma(x-\frac{d}{2})}} - 1 \right) \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} d_u = 5.0 \times 10^{-5}, d_v = 3.0 \times 10^{-5}, \\ d_w = 4.0 \times 10^{-5}, \\ k_2 = 0.032, k_3 = 1.0, k_4 = 0.01, \\ \theta = 4.0, d = 0.025, \gamma = 100.0 \\ k_1, \tau, \varepsilon \text{ はコントロールパラメータ.} \end{array}$$

