

応用数学勉強会 レクチャーノート

数値分岐計算法入門

長山 雅晴

北海道大学電子科学研究所
附属社会創造数学研究センター

第1章 はじめに

本稿は応用数学勉強会において分岐数値計算法について講演した内容に対するレクチャーノートです。このレクチャーノートは、矢留雅亮さんの博士論文と修士論文の原稿に基づいて私が責任をもって修正したものです。

このレクチャーノートでは空間1次元 M 変数の反応拡散系

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = D\Delta \mathbf{u} + \mathbf{f}(\mathbf{u}) \quad (1.1)$$

に対する大域的分岐構造を数値的に求める手法について解説します。この解説に基づいて反応拡散系分岐計算ソフトウェア (RD-AUTO) を開発しました。RD-AUTO の使い方は別途使用マニュアル (開発中) を読んでください。

近年、反応拡散系に対して、パルス波の分裂現象等の発見から [1, 2, 3], 解構造を数値的に求めることによって、パターンの変移ダイナミクスを研究することが行われてきました [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15]。微分方程式の大域的分岐構造を数値的に求めるための便利なソフトウェアとして AUTO が知られています [16, 17]。このソフトウェアは比較的システムサイズの小さい常微分方程式系の解構造を求めるには非常に有効なソフトです。しかし、反応拡散系の空間変数を離散化して得られるシステムサイズの大きな微分方程式系に対して、時間周期解を含む解構造を求めることは困難です¹。そのため、反応拡散系に現れる変移パターンダイナミクスの多くの研究は定常パルス波の分裂現象や進行パルス波に現れる反射現象など定常解の解構造から理解できる範囲にとどまっており、時間周期解を含めた変移パターンダイナミクスの数理解析はほとんど報告されていません。そこで、我々はシステムサイズが大きな系に対しても時間周期解も含めた分岐構造を求めることが可能となるソフトウェアの開発を行いました。本稿では、このソフトウェアを開発するために用いた分岐数値計算法について解説を行います。周期境界条件において反応拡散系に現れるパルス波の解構造を数値計算するための手法について記述していますが、本稿の手法は、他の境界条件においても有効に働くことは確認されています。

本原稿は次の4章から構成されています。2章では、本稿で取り扱う反応拡散系に現れるパルス波の定義を説明します。3章では、2章で定義したパルス波の解構造を数値的に求めるための計算法を説明します。ここでは、動座標系における定常解と周期解の数値計算法について解説しますが、これは速度が0であれば並進運動がなくなるため、定常解や重心運動が0である周期解の解構造を数値計算することと同じです。第4章では、具体的に2変数の反応拡散系に対して、第2章で定義したパルス波の解構造数値計算法について解説をします。反応拡散系の離散化は一般に差分法によって行われていますが、差分法による空間離散化誤差の影響で、解構造を精度良く計算できないことがわかりました。そのため、第5章では反応拡散系の空間微分に対してスペクトル法に用いることによって離散化誤差を低減し、定常解、進行波解、脈動定常解、脈動進行波解に対する解構造数値計算法について説明します。付録では、分岐数値計算をする上で知っておくと便利な事項をまとめておきます。

¹最近は大容量メモリーの計算機が安価に出てきたので、かなり大きなシステムサイズでも AUTO で計算可能となっていますが...

第2章 反応拡散系に現れるパルス波

このレクチャーノートでは、パルス波の解構造を数値的に求めるための手法を解説しています。そのため本章では、まず反応拡散系のパルス波解の定義を行います。次に、数値計算可能な形に置き換えるために、有限区間でのパルス波解の定義を与えます。3章以降では、この有限区間でのパルス波解の定義に基づいた数値計算法を解説していきます。

2.1 パルス波の解の定義

この節では空間1次元 M 変数反応拡散系

$$\begin{cases} \mathbf{V}_t = \mathbf{D}\mathbf{V}_{xx} + \mathbf{F}(\mathbf{V}), & t > 0, \quad x \in \mathbf{R}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} \mathbf{V}(t, x) = \mathbf{E}. \end{cases} \quad (2.1)$$

に現れるパルス波の解構造を数値的に求めるために解の定義を行う。ただし

$$\begin{aligned} \mathbf{V}(t, x) &= (V_1(t, x), V_2(t, x), \dots, V_n(t, x)) : \mathbf{R}_+ \times \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}^n, \\ \mathbf{F}(\mathbf{V}) &= (F_1(\mathbf{V}), F_2(\mathbf{V}), \dots, F_n(\mathbf{V})) : \mathbf{R}^n \longrightarrow \mathbf{R}^n, \\ \mathbf{D} &= \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n), \quad d_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq n \end{aligned}$$

である。ここで、 $\mathbf{E}$ は拡散項を無視した常微分方程式系

$$\dot{\mathbf{V}} = \mathbf{F}(\mathbf{V})$$

の漸近安定な平衡点とする。図 2.1 に2変数反応拡散系に現れる代表的な4種類のパルス波を示す [18, 19]。このとき、4つのパルス波の定義は以下のように与えられる。

定義 2.1 反応拡散系 (2.1) の解 $\mathbf{V}(t, x)$ が定常パルス波 (*standing pulse*) (図 2.1(a)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 ($\mathbf{U}(x)$) が存在することである：

$$\begin{cases} \mathbf{D}\mathbf{U}_{xx} + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, & x \in \mathbf{R}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} \mathbf{U}(x) = \mathbf{E}. \end{cases}$$

定義 2.2 反応拡散系 (2.1) の解 $\mathbf{V}(t, x)$ が速度 c の進行パルス波 (*travelling pulse*) (図 2.1(b)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 ($\mathbf{U}(z), c$) が存在することである：

$$\begin{cases} \mathbf{D}\mathbf{U}_{zz} + c\mathbf{U}_z + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, & z \in \mathbf{R}, \\ \lim_{|z| \rightarrow \infty} \mathbf{U}(z) = \mathbf{E}. \end{cases}$$

ただし $z = x - ct$ である。

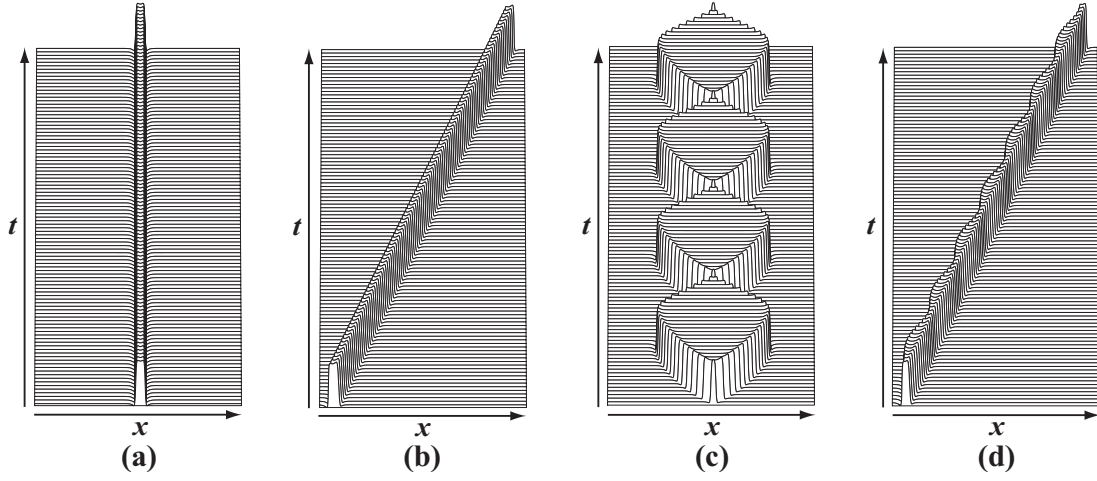


図 2.1: 4 種類のパルス波. (a) 定常パルス波, (b) 進行パルス波, (c) 脈動定常パルス波, (d) 脈動進行パルス波.

定義 2.3 反応拡散系 (2.1) の解 $V(t, x)$ が周期 T の脈動定常パルス波 (*standing breather pulse*) (図 2.1(c)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 $(U(t, x), T > 0)$ が存在することである :

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + F(U), & t > 0, \quad x \in \mathbf{R}, \\ \lim_{|x| \rightarrow \infty} U(t, x) = E, & t > 0, \\ U(t, x) = U(t + T, x), & t \geq 0, \quad x \in \mathbf{R}. \end{cases}$$

このとき, 周期 T とは $U(t, x) = U(t + T, x)$ を満たす最小正定数とする. すなわち, 任意の $t_0 \in (0, T)$ に対して $U(t, x) \neq U(t + t_0, x)$ となる.

定義 2.4 反応拡散系の解 $V(t, x)$ が平均速度 c , 周期 T の脈動進行パルス波 (*travelling breather pulse*) (図 2.1(d)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 $(U(t, z), T > 0, c)$ が存在することである :

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + F(U), & t > 0, \quad z \in \mathbf{R}, \\ \lim_{|z| \rightarrow \infty} U(t, z) = E, & t > 0, \\ U(t, z) = U(t + T, z), & t \geq 0, \quad z \in \mathbf{R}. \end{cases}$$

ただし, $z = x - ct$, T の定義は定義 2.3 と同様である.

パルス波は無限区間で定義されているため, そのまま数値的に求めることは困難で, 工夫が必要です. 無限区間を有限区間で近似する方法として truncated 法が知られています [20, 21]¹. この手法は有限区間で Homoclinic 軌道を近似しており, 有限区間での解と無限区間での解の誤差評価と指数的な誤差の減衰が証明された方法です. しかしながら, この方法は定常パルス波と進行パルス波しか計算することができないことやそれらの解の安定性を判定することができないなどの問題があります.

そこで, $\lim_{|z| \rightarrow \infty} u = E$ が指数的に漸近するならば, 十分長い区間 $I = (-L, L)$ に対してパルス波は区間の両端に指数関数的に平衡点 E に漸近するため, 区間の両端で (2.1) の第 2 式を近似す

¹AUTO では truncated 法を用いて進行波を求めている.

ることが期待できます。そのため、パルス波を数値的に求める必要条件として L を十分大きくとります。

2.2 有限区間に対するパルス波解の定義

本節では 2.1 節で定義したパルス波解を有限区間の数値計算で近似計算するために、有限区間でのパルス波の定義を与えます。そして、脈動定常パルス波や脈動進行パルス波による時間周期解も数値的に求めるために、無限区間で定義されたパルス波解を十分長い区間 $[-L, L)$ と周期境界条件

$$U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L)$$

によって近似します。この近似計算には数学的正当性はありませんが、パルス波解が指数的に $\lim_{|x| \rightarrow \infty} u(t, x) = E$ となれば良い近似計算になっていると期待できます。従って、我々は定義 2.1–定義 2.4 のパルス波解に代わって、有限区間に対するパルス波解の定義を以下のように与えます²。

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + F(U), & t > 0, \quad x \in [-L, L), \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L), & t > 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

ただし、 L は十分長い区間を与え、(2.2) は区間上の両端で常微分方程式系 $U_t = F(U)$ の漸近安定平衡点 E に十分近い値を持つと仮定します。すなわち、

$$U(t, \pm L) \approx E, \quad t > 0$$

である。このとき、定義 2.1–定義 2.4 は次のように書き換えられます：

定義 2.5 反応拡散系 (2.2) の解 $U(t, x)$ が定常パルス波 (*standing pulse*) (図 2.1(a)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 ($V(x)$) が存在することである：

$$\begin{cases} DV_{xx} + F(V) = 0, & x \in [-L, L), \\ V(-L) = V(L), \quad V_x(-L) = V_x(L). \end{cases}$$

定義 2.6 反応拡散系 (2.2) の解 $U(t, x)$ が速度 $c \in \mathbb{R}$ の進行パルス波 (*traveling pulse*) (図 2.1(b)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 ($V(z), c$) が存在することである：

$$\begin{cases} DV_{zz} + cV_z + F(V) = 0, & z \in [-L, L), \\ V(-L) = V(L), \quad V_z(-L) = V_z(L). \end{cases}$$

ただし、 $z = x - ct$ 。特に、 $c = 0$ のとき解 ($V(z), c$) は定常パルス波となる。

定義 2.7 反応拡散系 (2.2) の解 $U(t, x)$ が最小周期 $T \in \mathbb{R}_+$ の脈動定常パルス波 (*standing breather pulse*) (図 2.1(c)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 ($V(t, x), T$) が存在することである：

$$\begin{cases} V_t = DV_{xx} + F(V), & t > 0, \quad x \in [-L, L), \\ V(t, -L) = V(t, L), \quad V_x(t, -L) = V_x(t, L), & t > 0, \\ V(t, x) = V(t + T, x), & t > 0, \quad x \in [-L, L]. \end{cases}$$

²ここで定義される解は Wave Train 解と同値であるため、RD-AUTO は Wave Train 解の解構造を求めることが可能です。

定義 2.8 反応拡散系 (2.2) の解 $U(t, x)$ が平均速度 $c \in \mathbb{R}$, 最小周期 $T \in \mathbb{R}_+$ の脈動進行パルス波 (traveling breather pulse) (図 2.1(d)) であるとは次の方程式を満たす非自明解 $(V(t, z), T, c)$ が存在することである:

$$\begin{cases} V_t = DV_{zz} + cV_z + F(V), & t > 0, \quad z \in [-L, L], \\ V(t, -L) = V(t, L), \quad V_z(t, -L) = V_z(t, L), & t > 0, \\ V(t, z) = V(t + T, z), & t > 0, \quad z \in [-L, L]. \end{cases}$$

ただし, $z = x - ct$. 特に, $c = 0$ のとき解 $(V(t, z), T, c)$ は脈動定常パルス波となる.

定義 2.6, 2.8 からわかるように, パルス波解は動座標変換を行うことで反応拡散系の定常解と周期解を求めることに帰着できます. すなわち, 進行パルス波は反応拡散系の定常問題を求める問題と同等であり, 定義 2.8 から脈動進行パルス波は反応拡散系の周期解を求める問題と同等であることがわかります. 次の章ではこれらのパルス波解の解構造を数値的に求めるための計算方法について解説します.

第3章 反応拡散系に対する定常解と周期解の大域的分岐構造の数値計算法

本章では反応拡散系に現れる定常解，進行波解，脈動定常解，脈動進行波解の解構造を数値的に求める計算法について説明します．3.1節では定常解に対する解構造数値計算法を解説します．これによって反応拡散系の standing pulse 解と traveling pulse 解に対する解構造を求めることが可能となります．3.2節では時間周期解に対する解構造数値計算法を解説し，3.3節では不安定性の高い周期解を数値計算するための手法について解説します．これらの方法から脈動定常解と脈動進行波解に対する解構造を求めることが可能となります．

3.1 定常解の数値計算法 –差分法–

本節では空間1次元 M 変数反応拡散系

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + \mathbf{F}(U; \lambda), & t > 0, \quad x \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L), & t > 0, \\ U(0, x) = U_0(x), & x \in [-L, L] \end{cases} \quad (3.1)$$

に現れる定常解と進行波解の解構造を数値的に求めるための計算法について説明します．ここで， $\lambda \in \mathbb{R}$ をコントロールパラメータとして反応項 $\mathbf{F}$ に含めていますが，拡散係数 D や区間 L をコントロールパラメータとしても本節で解説する数値計算法は同様に適用できます．進行波解は動座標変換で定常解となるため，(3.1) に対して未定数の進行パルス速度 $c \in \mathbb{R}$ を用いて動座標変換 $z = x - ct$ を行い，動座標系方程式

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + \mathbf{F}(U; \lambda), & t > 0, \quad z \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t > 0, \\ U(0, z) = U_0(z), & z \in [-L, L] \end{cases}$$

を得ることができます．(3.1) の定常解は，(3.1) の進行波解となります．すなわち，非線形の2点境界値問題

$$\begin{cases} \mathbf{H}(U_0, c, \lambda) := DU_{0zz} + cU_{0z} + \mathbf{F}(U_0; \lambda) = \mathbf{0}, & z \in [-L, L], \\ U_0(t, -L) = U_0(t, L), \quad U_{0z}(t, -L) = U_{0z}(t, L) \end{cases} \quad (3.2)$$

を満たす非自明解 (U_0, c) が存在するとき， $c \neq 0$ ならば進行波解， $c = 0$ ならば定常解となることがわかります．ただし， $\mathbf{0} := (0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^M$ とします．進行波解は空間並進性があるため， $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ を満たす解には一意性がありません．そこで，この空間並進の自由度を取り除くために，付録Aで解説するような空間に対する phase condition[16]を与えます．ここでは空間の phase condition として

$$P(U_0, c, \lambda) := \int_{-L}^L U_0(z) \cdot \overline{U_{0z}}(z) dz = 0 \quad (3.3)$$

を与えます. ただし, $\cdot$ は内積, $\bar{U}_0(z)$ は $(c, \lambda) = (\bar{c}, \bar{\lambda})$ に対する $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ の解を表します. 以上より, λ を与えることによって, (3.2) と (3.3) を含めた次の非線形方程式の解 (U_0, c, λ) を求める問題に帰着できます:

$$\begin{cases} \mathbf{H}(U_0, c, \lambda) = D\mathbf{U}_{0zz} + c\mathbf{U}_{0z} + \mathbf{F}(U_0; \lambda) = \mathbf{0}, & z \in [-L, L], \\ P(U_0, c, \lambda) = \int_{-L}^L U_0(z) \cdot \bar{U}_{0z}(z) dz = 0, \\ U_0(-L) = U_0(L), \quad U_{0z}(-L) = U_{0z}(L). \end{cases} \quad (3.4)$$

非線形方程式 (3.4) の数値解法には Newton 法を適用します.

次に, パラメータ λ を変化させながら解の枝を追跡することを考えます. 付録 B で解説するように, $\lambda = \lambda_s$ に対して saddle-node 分岐点を持つ場合, その分岐点後の解の枝を追跡することができなくなります. そのために, Keller が提案した saddle-node 分岐点後の解の枝を追跡できる pseudo-arclength continuation 法 [22] を導入します. Keller の方法はコントロールパラメータとして, λ の代わりに解の枝の接線方向をパラメータとして与えます. その新しいパラメータを s と表記すると, s 方向に微小なパラメータ変化量 Δs を与えることで, s に対して解の枝が saddle-node 分岐点を持たなくなるようにします. この方法では (U_0, c, λ) が未知数となり, 未知数の個数 $(M+2)$ が方程式 (3.4) の個数 $(M+1)$ に比べ 1 つ多くなります. 未知変数と方程式数を同じにするために (一意性を持たせるために), [22] で提案した方法と類似した次の方程式を与えます:

$$K(U_0, c, \lambda, s) := \theta_U \int_{-L}^L (U_0 - \bar{U}_0) \cdot \dot{U} dz + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \quad (3.5)$$

ここで, $(\bar{U}_0, \bar{c}, \bar{\lambda}) \in \mathbb{R}^{M+2}$ は (3.4) を満たす解とします. $(\dot{U}(z), \dot{c}, \dot{\lambda}) \in \mathbb{R}^{M+2}$ は $(\bar{U}_0, \bar{c}, \bar{\lambda})$ に対する解の枝の正規化された方向ベクトル, $(\theta_U, \theta_c, \theta_\lambda) \in \mathbb{R}$ は $(\dot{U}(z), \dot{c}, \dot{\lambda})$ 成分の重み, $s - \bar{s}$ はパラメータ変化量 Δs です. 以上より, Δs を与えれば, (3.4) と (3.5) を含めた次の非線形方程式の解 (U_0, c, λ) を求める問題に帰着できます:

$$\begin{cases} \mathbf{H}(U_0, c, \lambda) = D\mathbf{U}_{0zz} + c\mathbf{U}_{0z} + \mathbf{F}(U_0; \lambda) = \mathbf{0}, & z \in [-L, L], \\ P(U_0, c, \lambda) = \int_{-L}^L U_0(z) \cdot \bar{U}_{0z}(z) dz = 0, \\ K(U_0, c, \lambda, s) = \theta_U \int_{-L}^L (U_0 - \bar{U}_0) \cdot \dot{U} dz + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0, \\ U_0(-L) = U_0(L), \quad U_{0z}(-L) = U_{0z}(L). \end{cases} \quad (3.6)$$

(3.6) の数値解を求めるために差分法による離散化を行います. 区間 z を間隔 $\Delta z = 2L/J$ で離散化して, 区間の格子点を $z_j = -L + j\Delta z$, $j \in \mathbb{Z}$ と表します. 最初に, (3.6) の離散化に必要な変数を導入します:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_j &= (u_{1,j}, \dots, u_{M,j}) := \mathbf{U}_0(z_j) = (U_{0,1}(z_j), \dots, U_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \bar{\mathbf{u}}_j &= (\bar{u}_{1,j}, \dots, \bar{u}_{M,j}) := \bar{\mathbf{U}}_0(z_j) = (\bar{U}_{0,1}(z_j), \dots, \bar{U}_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \dot{\mathbf{u}}_j &= (\dot{u}_{1,j}, \dots, \dot{u}_{M,j}) := \dot{\mathbf{U}}(z_j) = (\dot{U}_1(z_j), \dots, \dot{U}_M(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{f}_j &= (f_{1,j}, \dots, f_{M,j}) := \mathbf{F}(U_0(z_j)) = (F_1(U_0(z_j)), \dots, F_M(U_0(z_j))) \in \mathbb{R}^M, \\ \tilde{u}_{(m-1)J+j+1} &:= u_{m,j}, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \tilde{\mathbf{u}} &:= (\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_{MJ}) \in \mathbb{R}^{MJ}. \end{aligned}$$

(3.6) の空間微分を中心差分, P , K の積分を台形公式で近似すると, (3.6) の離散化から, 次の $(MJ+2)$ 元連立非線形方程式が得られます:

$$\left\{ \begin{array}{l} \widetilde{H}(\widetilde{\mathbf{u}}, c, \lambda) := D \frac{\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1}}{\Delta z^2} + c \frac{\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{u}_{j-1}}{2\Delta z} + \mathbf{f}_j = \mathbf{0}, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \widetilde{P}(\widetilde{\mathbf{u}}, c, \lambda) := \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{u}_j \cdot (\bar{\mathbf{u}}_{j+1} - \bar{\mathbf{u}}_{j-1}) = 0, \\ \widetilde{K}(\widetilde{\mathbf{u}}, c, \lambda, s) := \theta_u \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{u}_j - \bar{\mathbf{u}}_j) \cdot \dot{\mathbf{u}}_j \Delta z + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0, \\ \mathbf{u}_{-1} = \mathbf{u}_{J-1}, \quad \mathbf{u}_J = \mathbf{u}_0. \end{array} \right. \quad (3.7)$$

ただし, $\bar{\mathbf{u}}_{-1} = \bar{\mathbf{u}}_{J-1}$, $\bar{\mathbf{u}}_J = \bar{\mathbf{u}}_0$, $\widetilde{\mathbf{H}} \in \mathbb{R}^{MJ}$, $\widetilde{P}, \widetilde{K} \in \mathbb{R}$ です. 連立非線形方程式 (3.7) の数値解 $\mathbf{x} := (\widetilde{\mathbf{u}}, c, \lambda) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ を得るための計算法には Newton 法を用います. Newton 法は次の連立 1 次方程式 $(A(\mathbf{x}^{(\nu)}) \Delta \mathbf{x}^{(\nu)} = \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)}))$, すなわち

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} & \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} & \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \lambda} \end{pmatrix}}_{A(\mathbf{x}^{(\nu)})} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^{(\nu)} \\ \Delta c^{(\nu)} \\ \Delta \lambda^{(\nu)} \end{pmatrix}}_{\Delta \mathbf{x}^{(\nu)}} = - \underbrace{\begin{pmatrix} \widetilde{H} \\ \widetilde{P} \\ \widetilde{K} \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)})} \quad (3.8)$$

を解いて $\Delta \mathbf{x}^{(\nu)}$ を求め¹

$$\mathbf{x}^{(\nu+1)} = \mathbf{x}^{(\nu)} + \Delta \mathbf{x}^{(\nu)} \quad (3.9)$$

を計算し, $\mathbf{x}^{(\nu+1)}$ が収束条件

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu+1)})\|_\infty < \delta \quad (3.10)$$

を満たすまで, (3.8)–(3.10) を繰り返します. ただし, (ν) は Newton 法の反復回数, $\|\cdot\|_\infty$ は最大値ノルム², δ は十分小さな値とします. 連立 1 次方程式 (3.8) の解法として直接法を用いることは可能ですが, 数値計算速度を考慮し, ここでは $\partial \widetilde{H} / \partial \widetilde{\mathbf{u}}$ が疎行列であることに注目して直接法より高速計算できる方法について説明します. ただし, 以下の説明では Newton 法の反復回数の記号は省略しています. (3.8) の $\Delta \mathbf{u}$ の方程式を

$$\Delta \mathbf{u} = \underbrace{-\left(\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}}\right)^{-1} \widetilde{H}}_{\Delta \widetilde{\mathbf{u}}} - \underbrace{\left(\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}}\right)^{-1} \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial c}}_{\Delta \widetilde{c}} \Delta c - \underbrace{\left(\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}}\right)^{-1} \frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \lambda}}_{\Delta \widetilde{\lambda}} \Delta \lambda \quad (3.11)$$

¹(3.8) の $\widetilde{\mathbf{H}} = (\widetilde{H}_1, \dots, \widetilde{H}_{MJ+2}) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ と $\widetilde{\mathbf{u}} = (\widetilde{u}_1, \dots, \widetilde{u}_{MJ+2}) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ の偏微分は $\frac{\partial \widetilde{H}}{\partial \widetilde{u}} := \left(\frac{\partial \widetilde{H}_i}{\partial \widetilde{u}_j}\right)_{1 \leq i, j \leq MJ+2}$ と定義します. 以下, 本論文ではベクトル同士の偏微分を同じように定義します.
² $\mathbf{B} = (b_1, \dots, b_{MJ+2}) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ の最大値ノルムは $\|\mathbf{B}\|_\infty := \max\{|b_1|, \dots, |b_{MJ+2}|\}$ と定義する. 以下, 本論文では $\|\cdot\|_\infty$ を同じように定義する.

とにおいて

$$\begin{cases} \frac{\partial \widetilde{\mathbf{H}}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\mathbf{u}} = -\widetilde{\mathbf{H}}, \\ \frac{\partial \widetilde{\mathbf{H}}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{c} = -\frac{\partial \widetilde{\mathbf{H}}}{\partial c}, \\ \frac{\partial \widetilde{\mathbf{H}}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\lambda} = -\frac{\partial \widetilde{\mathbf{H}}}{\partial \lambda} \end{cases} \quad (3.12)$$

から $(\Delta \widetilde{\mathbf{u}}, \Delta \widetilde{c}, \Delta \widetilde{\lambda})$ を求め, (3.11) を

$$\Delta \mathbf{u} = \Delta \widetilde{\mathbf{u}} + \Delta \widetilde{c} \Delta c + \Delta \widetilde{\lambda} \Delta \lambda \quad (3.13)$$

と書き換えます. (3.13) を (3.8) の Δc と $\Delta \lambda$ の方程式に代入すると

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial c} + \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{c} & \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \lambda} + \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial c} + \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{c} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \lambda} + \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \widetilde{P} + \frac{\partial \widetilde{P}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\mathbf{u}} \\ \widetilde{K} + \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}} \Delta \widetilde{\mathbf{u}} \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

が得られます. (3.14) から $(\Delta c, \Delta \lambda)$ が求まれば, (3.13) から $\Delta \mathbf{u}$ が求まります. (3.11)–(3.14) の一連作業は (3.8) の解 $\Delta \mathbf{x}$ を求めたことに対応しています. この方法で最も計算時間を必要とする部分は連立 1 次方程式 (3.12) を解く部分ですが, $\partial \widetilde{\mathbf{H}} / \partial \widetilde{\mathbf{u}}$ は帯行列を持つ疎行列であるため反復法を用いた計算ができます. 反復法の解法は, 例えば, 不完全 LU 分解の前処理付き CGS 法 (ILUCGS 法) を用いることができます. ILUCGS 法は必ずしも解が収束する保証はありませんが, メモリサイズの節約ができ, 計算速度が直接法よりも非常に速くなります.

(3.7) の解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(*)}$ を求めたら, 次に方向ベクトルを更新します. 次のステップの方向ベクトル $\dot{\mathbf{x}}_n := (\dot{\mathbf{u}}_n, \dot{c}_n, \dot{\lambda}_n) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ は, 次の連立 1 次方程式

$$\begin{aligned} A(\mathbf{x}^{(*)}) \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{b}, \\ \mathbf{b} &= {}^t(0, \dots, 0, 1) \end{aligned}$$

を解き, 求めた $\dot{\mathbf{y}}$ を正規化し

$${}^t \dot{\mathbf{x}}_n = \frac{\dot{\mathbf{y}}}{\|\dot{\mathbf{y}}\|_2}.$$

として求めることができます. ただし, $\|\cdot\|_2$ はユークリッドノルム³を表します.

3.1.1 定常解の安定性と分岐

ここでは空間 1 次元 M 変数反応拡散系 (3.1) に対する進行波解 (定常解) の安定性について説明します. (3.7) の解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(*)}$ とおくと, 進行波解 (定常解) の安定性は線形化行列 $\partial \widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{(*)}) / \partial \widetilde{\mathbf{u}}$ の固有値を調べることで判断できます. すなわち, 線形化行列 $\partial \widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{(*)}) / \partial \widetilde{\mathbf{u}}$ の固有値の実部が全て負であるときは, 進行波解 (定常解) は安定となります. 一方, 線形化行列 $\partial \widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{(*)}) / \partial \widetilde{\mathbf{u}}$ の固有値の実部が 1 つでも正であるときは, 進行波解 (定常解) は不安定となります. ただし, 進行波解 (定常解) は周期境界条件により空間並進性の自由度をもつため, 0 の固有値を必ず 1 つ持ちますが, この固有値は安定性に影響を与えないことがわかっています [23].

³ $\dot{\mathbf{y}} = (\dot{y}_1, \dots, \dot{y}_{MJ+2}) \in \mathbb{R}^{MJ+2}$ のユークリッドノルムは $\|\dot{\mathbf{y}}\|_2 := \sqrt{\dot{y}_1^2 + \dots + \dot{y}_{MJ+2}^2}$ と定義します. 以下, 本論文では $\|\cdot\|_2$ を同じように定義します.

パラメータの変化と共に線形化行列 $\partial \widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{(*)})/\partial \widetilde{\mathbf{u}}$ の固有値の 1 つが複素平面上の虚軸を横切るとき、次の 4 つのタイプの分岐が現れることが知られています。図 3.1(a) のように、実固有値が複素平面上の虚軸を横切るときは、saddle-node 分岐、transcritical 分岐、pitch-fork 分岐が現れます。一方、図 3.1(b) のように、複素共役な 2 つの固有値の組が複素平面上の虚軸を横切るときは Hopf 分岐が現れます。

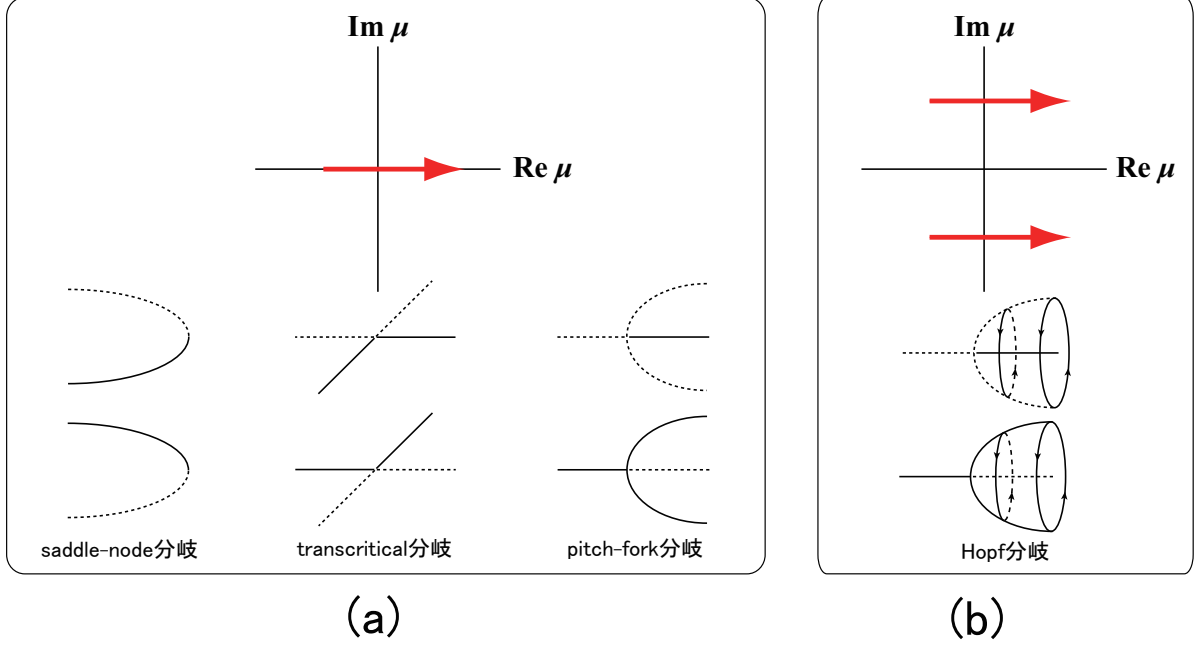


図 3.1: 定常解に現れる分岐の種類. (a) : 実固有値が虚軸を横切るとき. (b) : 複素固有値が虚軸を横切るとき. 実線が安定解, 破線が不安定解. μ は線形化行列 $\partial \widetilde{\mathbf{H}}(\mathbf{x}^{(*)})/\partial \widetilde{\mathbf{u}}$ の固有値.

3.2 周期解の数値計算法 (Single Shooting 法) –差分法–

本節では空間 1 次元 M 変数反応拡散系

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + \mathbf{F}(\mathbf{U}; \lambda), & t > 0, \quad x \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L), & t > 0, \\ U(0, x) = U_0(x), & x \in [-L, L] \end{cases} \quad (3.15)$$

に現れる脈動定常解と脈動進行波解の解構造を数値的に求めるための計算法について説明します. ここでは, $\lambda \in \mathbb{R}$ をコントロールパラメータとして, 反応項 $\mathbf{F}$ に含まれているとしますが, 拡散係数 D や区間 L をコントロールパラメータとしても本節で解説する数値計算法は同様に適用できます. 脈動進行波解は動座標変換によって動座標系上での脈動定常解となります. そこで, REDSS-01 に対して未定数の平均速度 $c \in \mathbb{R}$ を用いた動座標変換 $z = x - ct$ を行います. すると動座標系方程式

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + \mathbf{F}(\mathbf{U}; \lambda), & t > 0, \quad z \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t > 0, \\ U(0, z) = U_0(z), & z \in [-L, L] \end{cases} \quad (3.16)$$

を得ることができます. (3.16) が脈動定常解を持てば, その解は (3.15) の脈動進行波解に対応します. すなわち, 未定数の脈動進行パルス波平均速度 $\bar{c} \in \mathbb{R}$ とある最小周期 $\bar{T} \in \mathbb{R}$ に対して, 方程式

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + \bar{c}U_z + \mathbf{F}(U; \bar{\lambda}), & t \in (0, \bar{T}], \quad z \in [-L, L), \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t \in (0, \bar{T}], \\ U(0, z) = \bar{U}_0(z), & z \in [-L, L], \\ U(0, z) = U(\bar{T}, z), & z \in [-L, L] \end{cases} \quad (3.17)$$

を満たす非自明解 $(\bar{U}_0, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ が存在するとき, $\bar{c} \neq 0$ ならば脈動進行波解, $\bar{c} = 0$ ならば脈動定常解となります.

そのため, 脈動定常解と脈動進行波解は (3.16) の周期解を求める数値計算法で求めることが可能です. 周期解を数値的に求める方法として Newton Single Shooting 法 ([24, 25]) が知られており, この方法を反応拡散系に適用します. この数値計算では周期を 1 に規格化するため, (3.17) に対して $\tilde{t} = t/\bar{T}$ と変数変換を行います. このとき, $\tilde{t}$ をふたたび t で書き換えると, (3.17) は次のように表されます:

$$\begin{cases} U_t = \bar{T}(DU_{zz} + \bar{c}U_z + \mathbf{F}(U; \bar{\lambda})), & t \in (0, 1], \quad z \in [-L, L), \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t \in (0, 1], \\ U(0, z) = \bar{U}_0(z), & z \in [-L, L], \\ U(0, z) = U(1, z), & z \in [-L, L]. \end{cases} \quad (3.18)$$

(3.18) の解 $(\bar{U}_0, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ を数値的に求めるため, (3.16) に対しても同様な変数変換を行います. すなわち, (3.16) に対してある最小周期 $T \in \mathbb{R}$ を用いて $\tilde{t} = t/T$ と変数変換を行い, $\tilde{t}$ をふたたび t で書き換えます. このとき, (??) は次のように表されます:

$$\begin{cases} U_t = T(DU_{zz} + cU_z + \mathbf{F}(U; \lambda)), & t > 0, \quad z \in [-L, L), \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t > 0, \\ U(0, z) = U_0(z), & z \in [-L, L]. \end{cases} \quad (3.19)$$

ここで, 初期値 U_0 に対する (3.19) の時間発展解を $\Phi(t, z; U_0, T, c, \lambda)$ として, $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^M$ を次のように定義します:

$$\mathbf{H}(U_0, T, c, \lambda) := \Phi(1, z; U_0, T, c, \lambda) - U_0(z), \quad z \in [-L, L]. \quad (3.20)$$

(3.20) は $(U, T, c, \lambda) = (\bar{U}, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ のとき $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ となります. ただし, $\mathbf{0} := (0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^M$ です. $\mathbf{H}(U_0, T, c, \lambda) = \mathbf{0}$ を満たす解は時間並進性と空間並進性の自由度があるため, 解に一意性はありません. これらの並進性の自由度を取り除くために, 付録 A で解説する時間と空間に対する phase condition[1] を与えます. ここでは時間と空間に対する phase condition として, 次のように与えます:

$$P_1(U_0, T, c, \lambda) := \int_0^1 \int_{-L}^L \left(D\bar{U}_{zz}(t, z) + \bar{c}\bar{U}_z(t, z) + \mathbf{F}(\bar{U}(t, z); \bar{\lambda}) \right) \cdot \Phi(t, z; U_0, T, c, \lambda) dz dt = 0, \quad (3.21)$$

$$P_2(U_0, T, c, \lambda) := \int_{-L}^L U_0(z) \cdot \bar{U}_{0z}(z) dz = 0.$$

ただし、 $\cdot$ は内積、 $(\bar{\mathbf{U}}_0, \bar{\mathbf{U}})$ は $(T, c, \lambda) = (\bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ に対する $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ の解とします。以上より、 λ を与えることによって、(3.20) と (3.21) を含めた次の非線形方程式の解 $(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda)$ を求める問題に帰着できます：

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \Phi(1, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_0(z) = \mathbf{0}, \quad z \in [-L, L], \\ P_1(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \int_0^1 \int_{-L}^L \left(D\bar{\mathbf{U}}_{zz}(t, z) + \bar{c}\bar{\mathbf{U}}_z(t, z) \right. \\ \quad \left. + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(t, z); \bar{\lambda}) \right) \cdot \Phi(t, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) dz dt = 0, \\ P_2(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \int_{-L}^L \mathbf{U}_0(z) \cdot \bar{\mathbf{U}}_{0z}(z) dz = 0. \end{array} \right. \quad (3.22)$$

非線形方程式 (3.22) の数値解法には Newton 法を適用します。次に、パラメータ λ を変化しながら周期解の枝を追跡することを考えます。付録 B で解説するように、 $\lambda = \lambda_s$ に対して saddle-node 分岐点を持つ場合、その分岐点後の解の枝を追跡することができません。そのため、Keller が提案した saddle-node 分岐点後の解の枝を追跡できる pseudo-arclength continuation 法 [22] を用います。Keller の方法はコントロールパラメータとして、 λ の代わりに解の枝の接線方向をパラメータとして与えます。その新しいパラメータを s と表記すると、 s 方向に微小なパラメータ変化量 Δs を与えることで、 s に対して解の枝が saddle-node 分岐点を持たなくなります。この方法では $(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda)$ が未知数となるため、未知数の個数 $(M+3)$ が方程式 (3.22) の個数 $(M+2)$ より 1 つ多くなります。そのため、[22] で提案した方法と類似した次の方程式を与えます：

$$K(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda, s) := \theta_U \int_{-L}^L (\mathbf{U}_0 - \bar{\mathbf{U}}_0) \cdot \dot{\mathbf{U}} dz + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \quad (3.23)$$

ここで、 $(\bar{\mathbf{U}}_0, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda}) \in \mathbb{R}^{M+3}$ は (3.22) を満たす解とします。 $(\dot{\mathbf{U}}(z), \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda}) \in \mathbb{R}^{M+3}$ は $(\bar{\mathbf{U}}_0, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ に対する解の枝の正規化された方向ベクトル、 $(\theta_U, \theta_T, \theta_c, \theta_\lambda) \in \mathbb{R}$ は $(\dot{\mathbf{U}}(z), \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ 成分の重み、 $s - \bar{s}$ はパラメータ変化量 Δs です。以上より、 Δs を与えることによって、(3.22) と (3.23) を含めた次の非線形方程式の解 $(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda)$ を求める次の問題に帰着できます：

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \Phi(1, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_0(z) = \mathbf{0}, \quad z \in [-L, L], \\ P_1(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \int_0^1 \int_{-L}^L \left(D\bar{\mathbf{U}}_{zz}(t, z) + \bar{c}\bar{\mathbf{U}}_z(t, z) \right. \\ \quad \left. + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(t, z); \bar{\lambda}) \right) \cdot \Phi(t, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) dz dt = 0, \\ P_2(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = \int_{-L}^L \mathbf{U}_0(z) \cdot \bar{\mathbf{U}}_{0z}(z) dz = 0, \\ K(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda, s) = \theta_U \int_{-L}^L (\mathbf{U}_0 - \bar{\mathbf{U}}_0) \cdot \dot{\mathbf{U}} dz + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} \\ \quad + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{array} \right. \quad (3.24)$$

(3.24) の数値解を求めるために差分法による離散化を行います。時間 t と区間 z をそれぞれ間隔 $\Delta t = 1/T$, $\Delta z = 2L/J$ で離散化して、時間と区間の格子点をそれぞれ $t_n = n\Delta t$, $z_j = -L + j\Delta z$, $n, j \in \mathbb{Z}$ と表します。最初に、(3.19) の離散化に必要な格子点上の変数を導入します：

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}}_{0,j} &= (\hat{u}_{0,1,j}, \dots, \hat{u}_{0,M,j}) := \mathbf{U}_0(z_j) = (U_{0,1}(z_j), \dots, U_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{u}_j^n &= (u_{1,j}^n, \dots, u_{M,j}^n) := \mathbf{U}(t_n, z_j) = (U_1(t_n, z_j), \dots, U_M(t_n, z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{f}_j^n &= (f_{1,j}^n, \dots, f_{M,j}^n) := \mathbf{F}(\mathbf{u}_j^n) = (F_1(\mathbf{u}_j^n), \dots, F_M(\mathbf{u}_j^n)) \in \mathbb{R}^M. \end{aligned} \quad (3.25)$$

(3.25) の変数を用いて、次のように (3.19) の時間微分を前進差分、空間微分を陰的に与えた中心差分で離散化します：

$$\begin{cases} \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\Delta t} = T \left(D \frac{\mathbf{u}_{j-1}^{n+1} - 2\mathbf{u}_j^{n+1} + \mathbf{u}_{j+1}^{n+1}}{\Delta z^2} + c \frac{\mathbf{u}_{j+1}^{n+1} - \mathbf{u}_{j-1}^{n+1}}{2\Delta z} + \mathbf{f}_j^n \right), \\ \mathbf{u}_{-1}^n = \mathbf{u}_{J-1}^n, \quad \mathbf{u}_J^n = \mathbf{u}_0^n, \\ \mathbf{u}_j^0 = \hat{\mathbf{u}}_{0,j}. \end{cases} \quad (3.26)$$

ただし、 $0 \leq n$, $0 \leq j \leq J-1$ とする。次に、(3.19) の時間発展解 $\Phi(t, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda)$ を離散近似するために、次の新しい変数を導入します：

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{u}}_{0,(m-1)J+j+1} &:= \hat{\mathbf{u}}_{0,m,j}, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \tilde{\mathbf{u}}_0 &:= (\tilde{u}_{0,1}, \dots, \tilde{u}_{0,MJ}) \in \mathbb{R}^{MJ}. \end{aligned}$$

このとき、初期値 $\tilde{\mathbf{u}}_0$ に対する (3.26) の時間発展解を次のように表します：

$$\begin{aligned} \varphi_j^n(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) &= (\varphi_{1,j}^n(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda), \dots, \varphi_{M,j}^n(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda)) \\ &:= \Phi(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = (\Phi_1(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda), \dots, \Phi_M(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda)). \end{aligned}$$

次に、(3.24) を離散化するために、次の新しい変数を導入します：

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_{(m-1)J+j+1}^N &:= \varphi_{m,j}^N, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \tilde{\varphi} &:= (\tilde{\varphi}_1^N, \dots, \tilde{\varphi}_{MJ}^N) \in \mathbb{R}^{MJ}, \\ \bar{\mathbf{u}}_j^n &= (\bar{u}_{1,j}^n, \dots, \bar{u}_{M,j}^n) := \bar{\mathbf{U}}(t_n, z_j) = (\bar{U}_1(t_n, z_j), \dots, \bar{U}_M(t_n, z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \dot{\mathbf{u}}_j &= (\dot{u}_{1,j}, \dots, \dot{u}_{M,j}) := \dot{\mathbf{U}}(z_j) = (\dot{U}_1(z_j), \dots, \dot{U}_M(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \bar{\mathbf{f}}_j^n &= (\bar{f}_{1,j}^n, \dots, \bar{f}_{M,j}^n) := \mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}_j^n) = (F_1(\bar{\mathbf{u}}_j^n), \dots, F_M(\bar{\mathbf{u}}_j^n)) \in \mathbb{R}^M. \end{aligned}$$

(3.24) の空間微分は中心差分、 P_1 , P_2 , K の積分は台形公式によって近似すると、(3.24) の離散化は次の $(MJ+3)$ 元連立非線形方程式が得られます：

$$\left\{ \begin{aligned} \widetilde{\mathbf{H}}(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) &:= \tilde{\varphi}(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) - \tilde{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{0}, \\ \widetilde{P}_1(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) &:= \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^{J-1} \left(D \frac{\bar{\mathbf{u}}_{j-1}^n - 2\bar{\mathbf{u}}_j^n + \bar{\mathbf{u}}_{j+1}^n}{\Delta z^2} + \bar{c} \frac{\bar{\mathbf{u}}_{j+1}^n - \bar{\mathbf{u}}_{j-1}^n}{2\Delta z} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\mathbf{f}}_j^n \right) \cdot \varphi_j^n(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) = 0, \\ \widetilde{P}_2(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) &:= \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{u}_j^0 \cdot (\bar{\mathbf{u}}_{j+1}^0 - \bar{\mathbf{u}}_{j-1}^0) = 0, \\ \widetilde{K}(\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda, s) &:= \theta_u \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{u}_j^0 - \bar{\mathbf{u}}_j^0) \cdot \dot{\mathbf{u}}_j \Delta z + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} \\ &\quad + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{aligned} \right. \quad (3.27)$$

ただし、 $\bar{\mathbf{u}}_{-1}^n = \bar{\mathbf{u}}_{J-1}^n$, $\bar{\mathbf{u}}_J^n = \bar{\mathbf{u}}_0^n$, $\sum_{n=0}^N \bar{a}_n = (a_1 + \dots + a_{N-1}) + (a_0 + a_N)/2$, $\widetilde{\mathbf{H}} \in \mathbb{R}^{MJ}$, $\widetilde{P}_1, \widetilde{P}_2, \widetilde{K} \in \mathbb{R}$ です。連立非線形方程式 (3.27) の数値解 $\mathbf{x} := (\tilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) \in \mathbb{R}^{MJ+3}$ を求める計算

法には Newton 法を適用します。Newton 法は、次の連立 1 次方程式 ($A(\mathbf{x}^{(\nu)})\Delta\mathbf{x}^{(\nu)} = \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)})$) すなわち

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_0} - I & \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{\varphi}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_0} & \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_0} & \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_0} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \lambda} \end{pmatrix}}_{A(\mathbf{x}^{(\nu)})} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^{(\nu)} \\ \Delta T^{(\nu)} \\ \Delta c^{(\nu)} \\ \Delta \lambda^{(\nu)} \end{pmatrix}}_{\Delta \mathbf{x}^{(\nu)}} = - \underbrace{\begin{pmatrix} \widetilde{H} \\ \widetilde{P}_1 \\ \widetilde{P}_2 \\ \widetilde{K} \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)})} \quad (3.28)$$

を解いて $\Delta\mathbf{x}^{(\nu)}$ を求め

$$\mathbf{x}^{(\nu+1)} = \mathbf{x}^{(\nu)} + \Delta\mathbf{x}^{(\nu)} \quad (3.29)$$

を計算し、 $\mathbf{x}^{(\nu+1)}$ が収束条件

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu+1)})\|_{\infty} < \delta \quad (3.30)$$

を満たすまで、(3.28)–(3.30) を繰り返すことです。ただし、 I は単位行列、 (ν) は Newton 法の反復回数、 $\|\cdot\|_{\infty}$ は最大値ノルム、 δ は十分小さな値とします。ここで、ヤコビ行列 A の計算は前進差分

$$A = \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \mathbf{x}} \approx \left[\frac{\mathbf{B}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}_1) - \mathbf{B}(\mathbf{x})}{\delta_{\text{ptb}}} \quad \dots \quad \frac{\mathbf{B}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\delta}_{MJ+3}) - \mathbf{B}(\mathbf{x})}{\delta_{\text{ptb}}} \right], \quad (3.31)$$

$$\boldsymbol{\delta}_p = (0, 0, \dots, \underbrace{\delta_{\text{ptb}}}_p, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{MJ+3}.$$

によって近似的に計算を行います。ただし、 δ_{ptb} は小さな値とします。ここで得られるヤコビ行列 A は密行列となり、連立 1 次方程式 (3.28) の解法には部分ピボット選択付きの LU 分解法を用います。周期解を求める計算で最も計算時間を要する部分は連立 1 次方程式を解く部分 (3.28) とヤコビ行列 A を求める部分 (3.31) です。この中で、ヤコビ行列 A を求める部分は各列に対して独立に解くことになりるので並列化が容易にでき高速計算が可能です。

(3.27) の解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(*)}$ を求めたら、次に方向ベクトルを更新します。次のステップの方向ベクトル $\dot{\mathbf{x}}_{\text{n}} := (\dot{\mathbf{u}}_{\text{n}}, \dot{T}_{\text{n}}, \dot{c}_{\text{n}}, \dot{\lambda}_{\text{n}}) \in \mathbb{R}^{MJ+3}$ は連立 1 次方程式

$$\begin{aligned} A(\mathbf{x}^{(*)}) \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{b}, \\ \mathbf{b} &= {}^t(0, \dots, 0, 1) \end{aligned}$$

を解き、求めた $\dot{\mathbf{y}}$ を正規化

$${}^t\dot{\mathbf{x}}_{\text{n}} = \frac{\dot{\mathbf{y}}}{\|\dot{\mathbf{y}}\|_2}.$$

とすることによって求めることができます。ただし、 $\|\cdot\|_2$ はユークリッドノルムを表します。

本節で解説した周期解の数値計算法は Newton Single Shooting 法 ([24, 25]) として知られています。この手法は高次元常微分方程式系の周期解を求めることができますが、周期解の不安定性が高い場合や周期 T が大きくなると、周期解を求めることが困難となります。困難となる理由は初期値 $\mathbf{x}$ の時間発展解 $\boldsymbol{\Phi}(t, z; \mathbf{x})$ が不安定成分の蓄積により、 $\boldsymbol{\Phi}(1, z; \mathbf{x})$ が初期値 $\mathbf{x}$ の近傍に戻らなく

なり, Newton 法の計算が発散するからです. この問題の解決策の 1 つとして, Newton Multiple Shooting 法 [26] が知られています.

3.2.1 周期解の安定性 (Single Shooting 法) と分岐

ここでは空間 1 次元 M 変数反応拡散系 (3.19) に対する脈動進行波解 (脈動定常解) の安定性について説明します. (3.27) の解を $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(*)}$ とすると, $\partial \tilde{\varphi}(\mathbf{x}^{(*)}) / \partial \tilde{\mathbf{u}}$ は Monodromy 行列と呼ばれており, 周期解の安定性は Monodromy 行列の固有値を調べることで判定できます [27]. Monodromy 行列の固有値の絶対値が全て複素平面上の単位円内部にあるとき, 脈動進行波解 (脈動定常解) は安定となり, Monodromy 行列の固有値の絶対値が 1 つでも複素平面上の単位円外部にあるとき, 脈動進行波解 (脈動定常解) は不安定となります. ただし, 脈動進行波解 (脈動定常解) は時間並進性の自由度と周期境界条件による空間並進性の自由度をもつため, 実固有値が 1 の固有値を必ず 2 つ持ちますが, この固有値は安定性に影響を与えないことがわかっています.

パラメータの変化と共に Monodromy 行列の固有値の絶対値が複素平面の単位円上を 1 つ横切るとき, 次の 5 つのタイプの分岐が現れることが知られています. 図 3.2(a) のように, 実固有値が複素平面上の 1 を横切るとき, saddle-node 分岐, transcritical 分岐, pitch-fork 分岐が現れます. 一方, 図 3.2(b) のように, 実固有値が複素平面上の -1 を横切るとき, 周期倍分岐が現れます. さらに, 図 3.2(c) のように, 複素共役な 2 つの固有値の組が複素平面上の単位円を横切るとき, torus 分岐が現れます.

3.3 周期解の数値計算法 (Multiple Shooting 法) –差分法–

本節では反応拡散系を離散化した差分方程式に Newton Multiple Shooting (NMS) 法を適用して脈動定常解と脈動進行波解の解構造を数値的に求める計算法について説明します. Newton Single Shooting (NSS) 法は周期軌道上の 1 点を Newton 法で求める手法ですが, NMS 法は周期軌道上の複数の点 (K 個) を Newton 法で求める手法です (図 3.3). NSS 法と NMS 法の時間発展解を解く回数はどちらも同じですが, NMS 法は周期を小区間で分割した各区間に対し Newton Shooting 法を用いるため, NSS 法に比べ時間発展解の不安定成分の蓄積量が小さくなります. そのため, NMS 法は不安定性が高い周期解や周期が大きい周期解を求めるとき有効です. しかし, NMS 法は Newton 法で計算する連立 1 次方程式のヤコビ行列の部分に NSS 法に比べ約 K 倍大きくなる欠点があります. (3.19) の時間発展解に対して NMS 法を適用するために, K 個の初期値 $\mathbf{U}_k(z)$ からの時間発展解を考えます:

$$\begin{cases} \mathbf{U}_t = T \left(D\mathbf{U}_{zz} + c\mathbf{U}_z + \mathbf{F}(\mathbf{U}; \lambda) \right), & t \in (h_k, h_{k+1}], \quad z \in [-L, L], \\ \mathbf{U}(t, -L) = \mathbf{U}(t, L), \quad \mathbf{U}_z(t, -L) = \mathbf{U}_z(t, L), & t \in (h_k, h_{k+1}], \\ \mathbf{U}(h_k, z) = \mathbf{U}_k(z), & z \in [-L, L]. \end{cases} \quad (3.32)$$

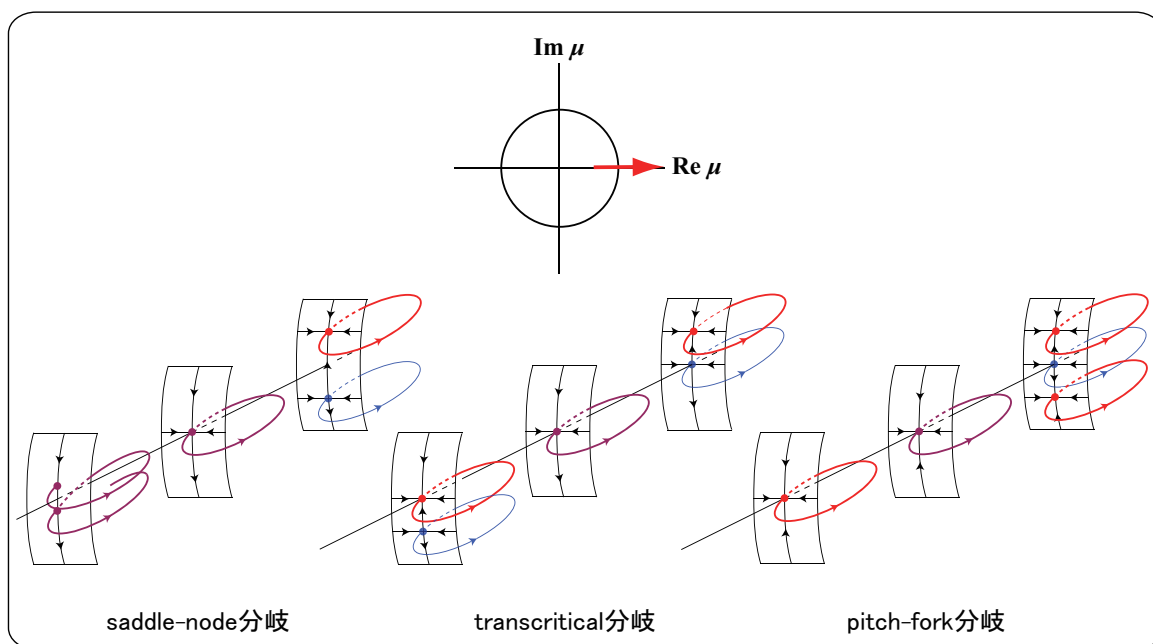
ただし, $1 \leq k \leq K$, h_k は次の条件を持つ時間区間 ((3.32) に対する周期 1) を K 個の小区間で分割したときの時間です:

$$0 = h_1 < h_2 < \cdots < h_K < h_{K+1} = 1.$$

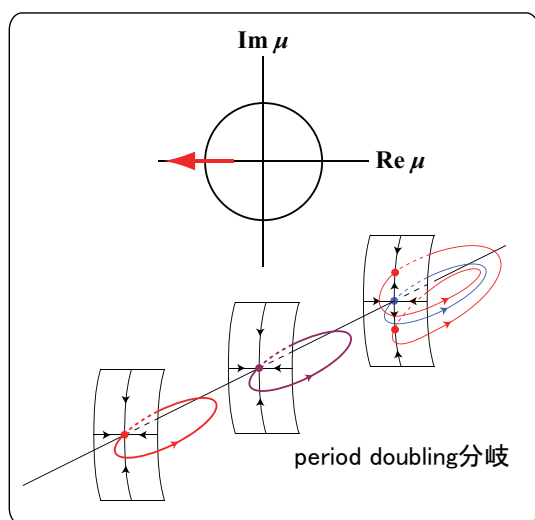
ここで, 各時間の間隔 Δh_k と $\check{k}$ をそれぞれ

$$\Delta h_k = h_{k+1} - h_k, \quad 1 \leq k \leq K,$$

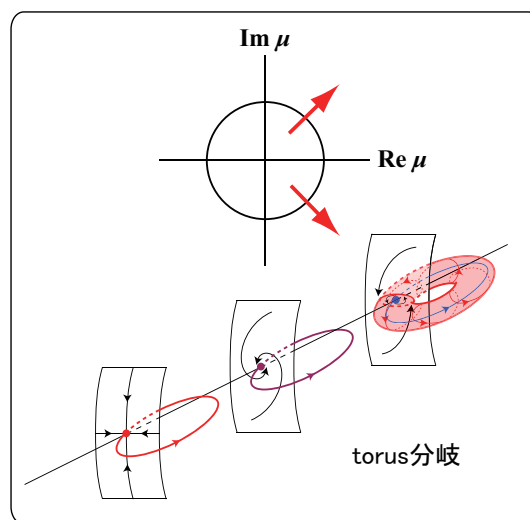
$$\check{k} = k \pmod K$$



(a)



(b)



(c)

図 3.2: 周期解に現れる分岐の種類. (a): 実固有値が複素平面上の 1 を横切るとき. (b): 実固有値が複素平面上の -1 を横切るとき. (c): 複素固有値が複素平面上の単位円を横切るとき. 赤色が安定解, 青色が不安定解. μ は Monodromy 行列の固有値.

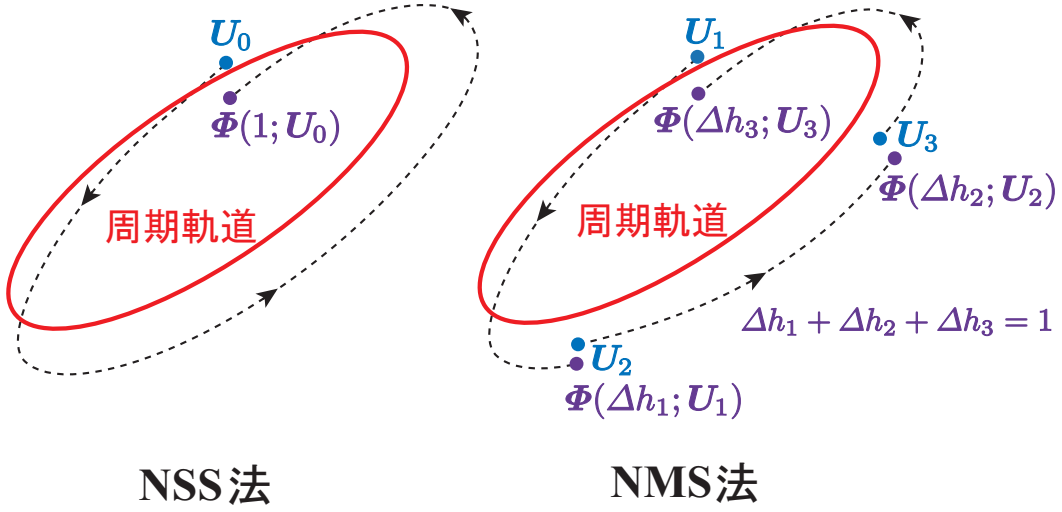


図 3.3: 左図と右図はそれぞれ Newton Single Shooting(NSS) 法と Newton Multipule Shooting(NMS) 法を表した模式図. NSS 法は周期軌道のある 1 点の初期値 U_0 を Newton 法で求めるのに対し, NMS 法では複数個の初期値 (この場合, 3 個の初期値 (U_1, U_2, U_3)) を Newton 法で求めます. ただし, 周期は 1 とします.

として与え, (3.32) の時間発展解を $\Phi(t, z; U_k, T, c, \lambda) \in \mathbb{R}^M$ とします. このとき, NMS 法を適用した場合の (3.32) の解 $(U_1, \dots, U_K, T, c, \lambda)$ がある最小周期 $\bar{T} \in \mathbb{R}$ と平均速度 $\bar{c} \in \mathbb{R}$ に対して方程式

$$\begin{cases} U_t = \bar{T} \left(DU_{zz} + \bar{c} U_z + F(U; \bar{\lambda}) \right), & t \in (h_k, h_{k+1}], \quad z \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t \in (h_k, h_{k+1}], \\ U(h_k, z) = \bar{U}_k(z), \quad z \in [-L, L], \\ U(h_{k+1}, z) = \Phi(\Delta h_k, z; \bar{U}_k), \quad z \in [-L, L] \end{cases} \quad (3.33)$$

が非自明解 $(\bar{U}_1, \dots, \bar{U}_K, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ を持つとき, $\bar{c} \neq 0$ ならば脈動進行波解, $\bar{c} = 0$ ならば脈動定常解となります. ただし, $1 \leq k \leq K$ です. (3.33) は $K = 1$ のとき (3.18) と同等となります. $H_k \in \mathbb{R}^M$ と $H \in \mathbb{R}^{KM}$ を

$$\begin{aligned} H_k(U_k, U_{k+1}, T, c, \lambda) &:= \Phi(\Delta h_k, z; U_k, T, c, \lambda) - U_{k+1}(z), \quad z \in [-L, L], \quad 1 \leq k \leq K, \\ H(U_1, \dots, U_K, T, c, \lambda) &:= {}^t(H_1, \dots, H_K) \end{aligned} \quad (3.34)$$

と定義すると, (3.34) は $(U_k, U_{k+1}, T, c, \lambda) = (\bar{U}_k, \bar{U}_{k+1}, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ のとき $H = \mathbf{0}$ となります. ただし, $\mathbf{0} := (0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{KM}$ です.

パラメータを変化させながら $H(U_1, \dots, U_K, T, c, \lambda) = \mathbf{0}$ を満たす周期解の解構造を求めるために, phase conditon(3.21) と pseudo-arclength continuation 法 (3.23) を与え, 次の非線形方程

式の解 $(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda)$ を計算します：

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{H}(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda) &= \begin{pmatrix} \mathbf{H}_1(\mathbf{U}_1, \mathbf{U}_2, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \mathbf{H}_k(\mathbf{U}_k, \mathbf{U}_{k+1}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \mathbf{H}_K(\mathbf{U}_K, \mathbf{U}_1, T, c, \lambda) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \Phi(\Delta h_1, z; \mathbf{U}_1, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_2(z) \\ \vdots \\ \Phi(\Delta h_k, z; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_{k+1}(z) \\ \vdots \\ \Phi(\Delta h_K, z; \mathbf{U}_K, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_1(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\ P_1(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda) &= \sum_{k=1}^K \int_{h_k}^{h_{k+1}} \int_{-L}^L \left(D\bar{\mathbf{U}}_{zz}(t, z) + \bar{c}\bar{\mathbf{U}}_z(t, z) \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(t, z); \bar{\lambda}) \right) \cdot \Phi(t, z; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda) dz dt = 0, \\ P_2(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda) &= \int_{-L}^L \mathbf{U}_1(z) \cdot \bar{\mathbf{U}}_{1z}(z) dz = 0, \\ K(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda, s) &= \theta_U \int_{-L}^L (\mathbf{U}_1(z) - \bar{\mathbf{U}}_1(z)) \cdot \dot{\mathbf{U}}(z) dz + \theta_T(T - \bar{T})\dot{T} \\ &\quad + \theta_c(c - \bar{c})\dot{c} + \theta_\lambda(\lambda - \bar{\lambda})\dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{aligned} \right. \quad (3.35)$$

ただし、 $\cdot$ は内積、 $(\bar{\mathbf{U}}_1(z), \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ と $\bar{\mathbf{U}}(t, z)$ は 1 つ前のステップの脈動進行波解 (脈動定常解)、 $(\dot{\mathbf{U}}(z), \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ は $(\bar{\mathbf{U}}_1, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ 点での解の枝に対する正規化した方向ベクトル、 $\theta_U, \theta_T, \theta_c, \theta_\lambda \in \mathbb{R}$ は $(\dot{\mathbf{U}}(z), \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ 成分の重み、 $s - \bar{s}$ はパラメータ変化量 Δs です。パラメータの変化量 Δs を与えて非線形方程式 (3.35) の解 $(\mathbf{U}_1, \dots, \mathbf{U}_K, T, c, \lambda)$ を数値的に求めるために、3.2 節と同様な離散化を行う。時間 t と区間 z をそれぞれ間隔 $\Delta t = 1/T$ 、 $\Delta z = 2L/J$ で離散化して、時間と区間の格子点をそれぞれ $t_n = n\Delta t$ 、 $z_j = -L + j\Delta z$ 、 $n, j \in \mathbb{Z}$ と表す。ここで、 h_k は時間の格子点上の値として、 $h_k = n_k\Delta t$ 、 $n_k \in \mathbb{N}^0$ の関係式を満たすとする。最初に、(3.32) の離散化に必要な変数を導入します：

$$\begin{aligned} \mathring{\mathbf{u}}_{k,j} &= (\mathring{u}_{k,1,j}, \dots, \mathring{u}_{k,M,j}) := \mathbf{U}_k(z_j) = (U_{k,1}(z_j), \dots, U_{k,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{u}_j^n &= (u_{1,j}^n, \dots, u_{M,j}^n) := \mathbf{U}(t_n, z_j) = (U_1(t_n, z_j), \dots, U_M(t_n, z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \mathbf{f}_j^n &= (f_{1,j}^n, \dots, f_{M,j}^n) := \mathbf{F}(\mathbf{u}_j^n) = (F_1(\mathbf{u}_j^n), \dots, F_M(\mathbf{u}_j^n)) \in \mathbb{R}^M. \end{aligned} \quad (3.36)$$

(3.36) の変数を用いて、(3.32) の時間微分を前進差分、空間微分を陰的に与えた中心差分で離散化します：

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\mathbf{u}_j^{n+1} - \mathbf{u}_j^n}{\Delta t} &= T \left(D \frac{\mathbf{u}_{j-1}^{n+1} - 2\mathbf{u}_j^{n+1} + \mathbf{u}_{j+1}^{n+1}}{\Delta z^2} + c \frac{\mathbf{u}_{j+1}^{n+1} - \mathbf{u}_{j-1}^{n+1}}{2\Delta z} + \mathbf{f}_j^n \right), \\ \mathbf{u}_{-1}^n &= \mathbf{u}_{J-1}^n, \quad \mathbf{u}_J^n = \mathbf{u}_0^n, \\ \mathbf{u}_j^{n_k} &= \mathring{\mathbf{u}}_{k,j}. \end{aligned} \right. \quad (3.37)$$

ただし, $1 \leq k \leq K$, $n_k \leq n \leq n_{k+1}$, $0 \leq j \leq J-1$ とします. 次に, (3.32) の時間発展解 $\Phi(t, z; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda)$ を離散近似するために, 次の新しい変数を導入します:

$$\begin{aligned}\tilde{u}_{k,(m-1)J+j+1} &:= \hat{u}_{k,m,j}, \quad 1 \leq k \leq K, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \tilde{\mathbf{u}}_k &:= (\tilde{u}_{k,1}, \dots, \tilde{u}_{k,MJ}) \in \mathbb{R}^{MJ}.\end{aligned}$$

このとき, 初期値 $\tilde{\mathbf{u}}_k$ に対する (3.37) の時間発展解を次のように表します:

$$\begin{aligned}\varphi_{k,j}^n(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda) &= (\varphi_{k,1,j}^n(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda), \dots, \varphi_{k,M,j}^n(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda)) \\ &:= \Phi(t_n, z_j; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda) = (\Phi_1(t_n, z_j; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda), \dots, \Phi_M(t_n, z_j; \mathbf{U}_k, T, c, \lambda)) \in \mathbb{R}^M.\end{aligned}$$

次に, (3.35) を離散化するために次の新しい変数を導入します:

$$\begin{aligned}\tilde{\varphi}_{k,(m-1)J+j+1}^{n_k}(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda) &:= \varphi_{k,m,j}^{n_k}(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda), \quad 1 \leq k \leq K, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \tilde{\boldsymbol{\varphi}}_k(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda) &:= (\tilde{\varphi}_{k,1}^{n_k}(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda), \dots, \tilde{\varphi}_{k,MJ}^{n_k}(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda)) \in \mathbb{R}^{MJ}, \\ \bar{\mathbf{u}}_j^n &= (\bar{u}_{1,j}^n, \dots, \bar{u}_{M,j}^n) := \bar{\mathbf{U}}(t_n, z_j) = (\bar{U}_1(t_n, z_j), \dots, \bar{U}_M(t_n, z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \dot{\mathbf{u}}_j &= (\dot{u}_{1,j}, \dots, \dot{u}_{M,j}) := \dot{\mathbf{U}}(z_j) = (\dot{U}_1(z_j), \dots, \dot{U}_M(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \bar{\mathbf{f}}_j^n &= (\bar{f}_{1,j}^n, \dots, \bar{f}_{M,j}^n) := \mathbf{F}(\bar{\mathbf{u}}_j^n) = (F_1(\bar{\mathbf{u}}_j^n), \dots, F_M(\bar{\mathbf{u}}_j^n)) \in \mathbb{R}^M.\end{aligned}$$

(3.35) の空間微分を中心差分, P_1 , P_2 , K の積分を台形公式で近似すると, (3.35) の離散化から次の $(KMJ+3)$ 元連立非線形方程式が得られます:

$$\left\{ \begin{aligned} \widetilde{\mathbf{H}}(\tilde{\mathbf{u}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda) &= \begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{H}}_1(\tilde{\mathbf{u}}_1, \tilde{\mathbf{u}}_2, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \widetilde{\mathbf{H}}_k(\tilde{\mathbf{u}}_k, \tilde{\mathbf{u}}_{k+1}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \widetilde{\mathbf{H}}_K(\tilde{\mathbf{u}}_K, \tilde{\mathbf{u}}_1, T, c, \lambda) \end{pmatrix} \\ &:= \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{\varphi}}_1(\tilde{\mathbf{u}}_1, T, c, \lambda) - \tilde{\mathbf{u}}_2(z) \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{\varphi}}_k(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda) - \tilde{\mathbf{u}}_{k+1}(z) \\ \vdots \\ \tilde{\boldsymbol{\varphi}}_K(\tilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda) - \tilde{\mathbf{u}}_1(z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\ \widetilde{P}_1(\tilde{\mathbf{u}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda) &:= \sum_{k=1}^K \sum_{n=n_k}^{n_{k+1}} \sum_{j=0}^{J-1} \left(D \frac{\bar{\mathbf{u}}_{j-1}^n - 2\bar{\mathbf{u}}_j^n + \bar{\mathbf{u}}_{j+1}^n}{\Delta z^2} + \bar{c} \frac{\bar{\mathbf{u}}_{j+1}^n - \bar{\mathbf{u}}_{j-1}^n}{2\Delta z} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\mathbf{f}}_j^n \right) \cdot \boldsymbol{\varphi}_j^n(\tilde{\mathbf{u}}_k, T, c, \lambda) = 0, \\ \widetilde{P}_2(\tilde{\mathbf{u}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda) &:= \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{u}_j^0 \cdot (\bar{\mathbf{u}}_{j+1}^0 - \bar{\mathbf{u}}_{j-1}^0) = 0, \\ \widetilde{K}(\tilde{\mathbf{u}}_1, \dots, \tilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda, s) &:= \theta_u \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{u}_j^0 - \bar{\mathbf{u}}_j^0) \cdot \dot{\mathbf{u}}_j \Delta z + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} \\ &\quad + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{aligned} \right. \quad (3.38)$$

ただし, $\bar{\mathbf{u}}_{-1}^n = \bar{\mathbf{u}}_{j-1}^n$, $\bar{\mathbf{u}}_j^n = \bar{\mathbf{u}}_0^n$, $\sum_{n=n_k}^{n_{k+1}} a_n = (a_{n_k+1} + \dots + a_{n_{k+1}-1}) + (a_{n_k} + a_{n_{k+1}})/2$, $\widetilde{\mathbf{H}} \in \mathbb{R}^{KMJ}$, $\widetilde{\mathbf{H}}_k \in \mathbb{R}^{MJ}$, $\widetilde{P}_1, \widetilde{P}_2, \widetilde{K} \in \mathbb{R}$ です. 連立非線形方程式 (3.38) の数値解 $\mathbf{x} := (\widetilde{\mathbf{u}}_1, \dots, \widetilde{\mathbf{u}}_K, T, c, \lambda) \in \mathbb{R}^{KMJ+3}$ の計算法には Newton 法を用います. Newton 法は次の連立 1 次方程式 ($A(\mathbf{x}^{(\nu)})\Delta\mathbf{x}^{(\nu)} = \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)})$), すなわち

$$\underbrace{\begin{pmatrix} G_1 & -I & & & \mathbf{r}_{1,T} & \mathbf{r}_{1,c} & \mathbf{r}_{1,\lambda} \\ & G_2 & -I & & \mathbf{r}_{2,T} & \mathbf{r}_{2,c} & \mathbf{r}_{2,\lambda} \\ & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & G_{K-1} & -I & \mathbf{r}_{K-1,T} & \mathbf{r}_{K-1,c} & \mathbf{r}_{K-1,\lambda} \\ -I & & & & G_K & \mathbf{r}_{K,T} & \mathbf{r}_{K,c} & \mathbf{r}_{K,\lambda} \\ {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_1,1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_1,2} & \dots & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_1,K-1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_1,K} & w_{\widetilde{P}_1,T} & w_{\widetilde{P}_1,c} & w_{\widetilde{P}_1,\lambda} \\ {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_2,1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_2,2} & \dots & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_2,K-1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_2,K} & w_{\widetilde{P}_2,T} & w_{\widetilde{P}_2,c} & w_{\widetilde{P}_2,\lambda} \\ {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{K},1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{K},2} & \dots & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{K},K-1} & {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{K},K} & w_{\widetilde{K},T} & w_{\widetilde{K},c} & w_{\widetilde{K},\lambda} \end{pmatrix}}_{A(\mathbf{x}^{(\nu)})} \underbrace{\begin{pmatrix} \Delta\mathbf{u}_1^{(\nu)} \\ \Delta\mathbf{u}_2^{(\nu)} \\ \vdots \\ \Delta\mathbf{u}_{K-1}^{(\nu)} \\ \Delta\mathbf{u}_K^{(\nu)} \\ \Delta T^{(\nu)} \\ \Delta c^{(\nu)} \\ \Delta\lambda^{(\nu)} \end{pmatrix}}_{\Delta\mathbf{x}^{(\nu)}} = - \underbrace{\begin{pmatrix} \widetilde{\mathbf{H}}_1 \\ \widetilde{\mathbf{H}}_2 \\ \vdots \\ \widetilde{\mathbf{H}}_{K-1} \\ \widetilde{\mathbf{H}}_K \\ \widetilde{P}_1 \\ \widetilde{P}_2 \\ \widetilde{K} \end{pmatrix}}_{\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu)})}, \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} G_k &:= \frac{\partial \widetilde{\varphi}_k}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_k}, \\ R_k &= \begin{bmatrix} \mathbf{r}_{k,T} & \mathbf{r}_{k,c} & \mathbf{r}_{k,\lambda} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \frac{\partial \widetilde{\varphi}_k}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{\varphi}_k}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{\varphi}_k}{\partial \lambda} \end{bmatrix}, \\ E_k &= \begin{bmatrix} {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_1,k} \\ {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{P}_2,k} \\ {}^t\mathbf{e}_{\widetilde{K},k} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} {}^t\left(\frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_k}\right) \\ {}^t\left(\frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_k}\right) \\ {}^t\left(\frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \widetilde{\mathbf{u}}_k}\right) \end{bmatrix}, \\ W &= \begin{bmatrix} w_{\widetilde{P}_1,T} & w_{\widetilde{P}_1,c} & w_{\widetilde{P}_1,\lambda} \\ w_{\widetilde{P}_2,T} & w_{\widetilde{P}_2,c} & w_{\widetilde{P}_2,\lambda} \\ w_{\widetilde{K},T} & w_{\widetilde{K},c} & w_{\widetilde{K},\lambda} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{P}_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{P}_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial T} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial c} & \frac{\partial \widetilde{K}}{\partial \lambda} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

を解いて $\Delta\mathbf{x}^{(\nu)}$ を求め

$$\mathbf{x}^{(\nu+1)} = \mathbf{x}^{(\nu)} + \Delta\mathbf{x}^{(\nu)} \quad (3.40)$$

を計算し、 $\mathbf{x}^{(\nu+1)}$ が収束条件

$$\|\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(\nu+1)})\|_\infty < \delta \quad (3.41)$$

を満たすまで、(3.39)–(3.41) を繰り返します。ただし、 I は単位行列、 (ν) は Newton 法の反復回数、 $\|\cdot\|_\infty$ は最大値ノルム、 δ は十分小さな値とします。(3.39) 次元連立 1 次方程式 (3.39) の解法には condensation 法 [28] を用います。各 $\Delta \mathbf{u}_k$ は次の漸化式

$$\Delta \mathbf{u}_{k+1} = G_k \Delta \mathbf{u}_k + [R_k \widetilde{\mathbf{H}}_k] \begin{bmatrix} \Delta T \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.42)$$

を満たすので、 $k = 2, \dots, K$ の $\Delta \mathbf{u}_k$ は $\Delta \mathbf{u}_1, \Delta T, \Delta c, \Delta \lambda$ を用いて表されます。ただし、Newton 法の反復回数の記号 (ν) は省略します。従って、 $(KMJ+3)$ 次元連立 1 次方程式 (3.39) は $(MJ+3)$ 次元に縮小できます：

$$\begin{bmatrix} \check{G} - I & \check{R} \\ \check{E} & \check{W} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{u}_1 \\ \Delta T \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \check{\mathbf{H}} \\ \check{P}_1 \\ \check{P}_2 \\ \check{K} \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

$$\check{G} := \prod_{j=0}^{K-1} G_{K-j},$$

$$[\check{R} \check{\mathbf{H}}] := \sum_{i=1}^K \left(\prod_{j=0}^{K-i-1} G_{K-j} \right) [R_i \widetilde{\mathbf{H}}_i],$$

$$\check{E} := \sum_{i=1}^K E_i \prod_{j=1}^{i-1} G_{i-j},$$

$$\begin{bmatrix} \check{W} & \check{P}_1 \\ \check{P}_2 & \check{K} \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} W & \widetilde{P}_1 \\ \widetilde{P}_2 & \widetilde{K} \end{bmatrix} + \begin{cases} \sum_{k=1}^{K-1} E_{k+1} \left(\sum_{i=1}^k \left(\prod_{j=0}^{k-i-1} G_{k-j} \right) [R_i \widetilde{\mathbf{H}}_i] \right), & K \neq 1, \\ O_{3,4}, & K = 1. \end{cases}$$

ただし、 $\prod_{j=m>n}^n G_j$ は J 次の単位行列、 $O_{3,4}$ は (3,4) 型の零行列です。(3.43) の行列は密行列となるため部分ピボット選択付きの LU 分解法を用いて $(\Delta \mathbf{u}_1, \Delta T, \Delta c, \Delta \lambda)$ を求めます。この解が求まれば (3.42) に代入して $2 \leq k \leq K$ に対する $\Delta \mathbf{u}_k$ を求めます。この一連作業は (3.39) の解 $\Delta \mathbf{x}$ を求めたことに対応します。

(3.38) の解 $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(*)}$ を求めたら、次に方向ベクトルを更新します。次のステップの方向ベクトル $\dot{\mathbf{x}}_n := (\dot{\mathbf{u}}_n, \dot{T}_n, \dot{c}_n, \dot{\lambda}_n) \in \mathbb{R}^{MJ+3}$ は次の連立 1 次方程式

$$\begin{bmatrix} \check{G} - I & \check{R} \\ \check{E} & \check{W} \end{bmatrix} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^{(*)}} \dot{\mathbf{y}} = \mathbf{b},$$

$$\mathbf{b} = {}^t(0, \dots, 0, 1)$$

を解き、求めた $\dot{\mathbf{y}}$ を

$${}^t \dot{\mathbf{x}}_n = \frac{\dot{\mathbf{y}}}{\|\dot{\mathbf{y}}\|_2}.$$

と正規化して求めます。ただし、 $\|\cdot\|_2$ はユークリッドノルムを表します。

3.3.1 周期解の安定性 (Multiple Shooting 法)

ここでは空間 1 次元 M 変数反応拡散系 (3.32) に対する脈動進行波解 (脈動定常解) の安定性について説明します. 脈動進行波解 (脈動定常解) の安定性は 3.2.1 節で解説したように, Monodromy 行列を調べることで判定できます. Multiple Shooting 法を用いたときの Monodromy 行列は軌道の合成関数

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{u}}_1 &= \tilde{\varphi}_K(\mathbf{x}_K^{(*)}) \\ &= \tilde{\varphi}_K(\tilde{\varphi}_{K-1}(\mathbf{x}_{K-1}^{(*)})) \\ &= \vdots \\ &= \tilde{\varphi}_K(\tilde{\varphi}_{K-1}(\tilde{\varphi}_{K-2}(\cdots(\tilde{\varphi}_1(\mathbf{x}_1^{(*)}))))\end{aligned}$$

から次のように構成することができます:

$$\text{Monodromy 行列} = \frac{\partial \tilde{\varphi}_K}{\partial \tilde{\mathbf{u}}_1}(\mathbf{x}_1^{(*)}) = \prod_{j=0}^{K-1} G_{K-j}. \quad (3.44)$$

ただし, $\mathbf{x}_k^{(*)} := (\tilde{\mathbf{u}}_k^{(*)}, T^{(*)}, c^{(*)}, \lambda^{(*)})$, $1 \leq k \leq K$ は (3.38) の解とします. ここで, (3.44) の Monodromy 行列は condensation 法で得られた (3.43) の $\check{G}(\mathbf{x}^{(*)})$ なので, 脈動進行波解 (脈動定常解) の安定性は Newton 法で収束した解に対して $\check{G}$ の固有値を計算することで得られます. 同様に, Monodromy 行列は各 $\mathbf{x}_k^{(*)}$ に対して,

$$\begin{aligned}\text{Monodromy 行列} &= \frac{\partial \tilde{\varphi}_k}{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{k+1}}(\mathbf{x}_k^{(*)}) \\ &= \prod_{j=0}^{k-1} G_{k-j} \prod_{j=k}^{K-1} G_{K+k-j}, \quad 1 \leq k \leq K\end{aligned}$$

と構成することができます. このとき, Monodromy 行列の固有値は $\mathbf{x}_k^{(*)}$ の選択に依存しないことがわかっています.

第4章 2変数反応拡散方程式系に対する数値計算法

これまで、一般的な数値計算方法を説明しましたが、それでは具体的な計算ができない可能性があります。本章では、2変数反応拡散系を用いて、具体的な数値計算手法の解説をします。RD-AUTOのデモプログラムは2変数反応拡散系になっているので、本章で解説した方法で作られています。なお、RD-AUTOでは、境界条件数を変えることで変数を変更することができるので、変数の制限はありません。

4.1 定常パルス波の数値計算法

この節では2変数反応拡散系に対する定常パルス波

$$\begin{cases} d_u u_{xx} + f(u, v) = 0, \\ d_v v_{xx} + g(u, v) = 0, \end{cases} \quad x \in [-L, L], \quad (4.1)$$

$$(u, v)(-L) = (u, v)(L), \quad (u_x, v_x)(-L) = (u_x, v_x)(L) \quad (4.2)$$

の数値計算法について解説します。(4.1), (4.2) に対して差分化を行います。区間 $2L$ を N 等分して $\Delta x = 2L/N$ とおき

$$x_i = -L + (i-1) \times \Delta x, \quad 1 \leq i \leq N, \\ u_i \equiv u(x_i), \quad v_i \equiv v(x_i)$$

とします。(4.1) に対して中心差分近似を行うと

$$\begin{cases} F_i \equiv d_u \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta x^2} + f(u_i, v_i) = 0, \quad 1 \leq i \leq N, \\ G_i \equiv d_v \frac{v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}}{\Delta x^2} + g(u_i, v_i) = 0, \quad 1 \leq i \leq N \end{cases} \quad (4.3)$$

を得ます。また、周期境界条件 (4.2) より

$$\begin{cases} u_0 = u_N, \quad u_{N+1} = u_1, \\ v_0 = v_N, \quad v_{N+1} = v_N \end{cases} \quad (4.4)$$

を得ます。従って、(4.3), (4.4) より連立非線形方程式

$$\begin{cases} \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (4.5)$$

が導かれます。ただし

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ F_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \begin{pmatrix} G_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ G_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix}$$

です. (4.5) に対して Newton 法 (Appendix(D.1)) を適用します. このとき, Newton 法による主な計算は連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{G} \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

から解 ${}^t(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{v})$ を求めることです. ただし,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \Delta \mathbf{u} &= {}^t(\Delta u_1, \dots, \Delta u_N), & \Delta \mathbf{v} &= {}^t(\Delta v_1, \dots, \Delta v_N) \end{aligned}$$

です. ヤコビ行列を詳しくみていくと

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial u_N} & \frac{\partial F_1}{\partial v_1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} & \frac{\partial F_2}{\partial u_3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial v_2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-2}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_N} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & 0 \\ \frac{\partial F_N}{\partial u_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_N}{\partial u_N} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_N}{\partial v_N} \\ \hline \frac{\partial G_1}{\partial u_1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_1}{\partial v_1} & \frac{\partial G_1}{\partial v_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_1}{\partial v_N} \\ 0 & \frac{\partial G_2}{\partial u_2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_2}{\partial v_1} & \frac{\partial G_2}{\partial v_2} & \frac{\partial G_2}{\partial v_3} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_{N-2}} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_N} \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_N}{\partial u_N} & \frac{\partial G_N}{\partial v_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_N}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial G_N}{\partial v_N} \end{pmatrix}$$

のような 7 重対角行列の形になります. 図 4.1 はこの行列を表したもので, 図中の各番号に入る要素を下記の表に示します. ただし

$$I = i - N, \quad R_u = \frac{d_u}{\Delta x^2}, \quad R_v = \frac{d_v}{\Delta x^2}$$

と置いています.

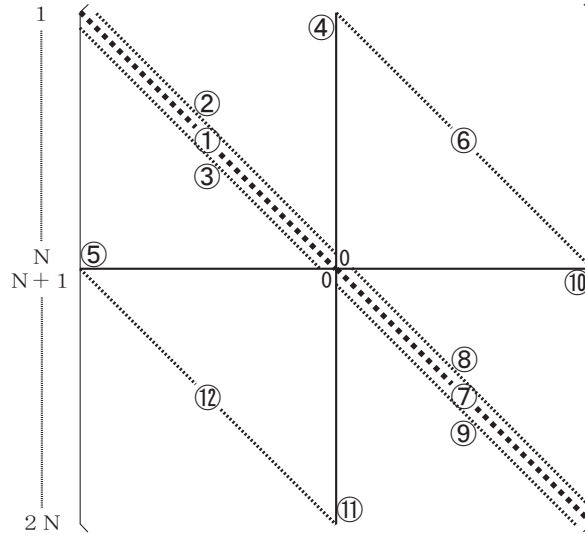


図 4.1: (4.6) のヤコビ行列

番号	i 行	j 列	要素の値
1	$1 \leq i \leq N$	$j = i$	$-2R_u + \frac{\partial f}{\partial u_i}(u_i, v_i)$
2	$1 \leq i \leq N-1$	$j = i+1$	R_u
3	$2 \leq i \leq N$	$j = i-1$	R_u
4	$i = 1$	$j = N$	R_u
5	$i = N$	$j = 1$	R_u
6	$1 \leq i \leq N$	$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\partial f}{\partial v_i}(u_i, v_i)$
7	$N+1 \leq i \leq 2N$	$j = i$	$-2R_v + \frac{\partial g}{\partial v_I}(u_I, v_I)$
8	$N+1 \leq i \leq 2N-1$	$j = i+1$	R_v
9	$N+2 \leq i \leq 2N$	$j = i-1$	R_v
10	$i = N+1$	$j = 2N$	R_v
11	$i = 2N$	$j = N+1$	R_v
12	$N+1 \leq i \leq 2N$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\partial g}{\partial u_I}(u_I, v_I)$

また, (4.6) の右辺は

$$\begin{pmatrix} F_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ F_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ F_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ G_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ G_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \\ \vdots \\ G_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_u(u_{1-1+N} - 2u_1 + u_2) + f(u_1, v_1) \\ \vdots \\ R_u(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) + f(u_i, v_i) \\ \vdots \\ R_u(u_{N-1} - 2u_N + u_{N+1-N}) + f(u_N, v_N) \\ R_v(v_{1-1+N} - 2v_1 + v_2) + g(u_1, v_1) \\ \vdots \\ R_v(v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}) + g(u_i, v_i) \\ \vdots \\ R_v(v_{N-1} - 2v_N + v_{N+1-N}) + g(u_N, v_N) \end{pmatrix}$$

となります. これより, ヤコビ行列と右辺を求めてから, 連立 1 次方程式 (4.6) を解くことになります. 疎行列を持つ連立 1 次方程式の数値解法には反復法が有効です. (4.6) の行列は非対称疎行列となっているため不完全 LU 分解の前処理付き CGS 法 (ILUCGS 法) を用いることにします. 必ずしも解が収束してくれる保証がないので注意が必要ですが, 計算速度は直接法に比べて非常に速くなります. 次に, この連立 1 次方程式から求まる解に対し

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{new} \\ \mathbf{v}_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \end{pmatrix}$$

とにおいて, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new})$ が (4.5) の解を満たすかどうか, 次の収束判定条件を行う:

$$\sum_{i=1}^{2N} \|H_i\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N F_i^2 + \sum_{i=1}^N G_i^2} \leq 2N\varepsilon.$$

ただし, ε は十分小さな値とします. このとき, 解 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new})$ が収束判定条件を満たさなければ, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new})$ を ${}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ とおきます. そして, 再び (4.6) のヤコビ行列と右辺を作り直し同じ作業を繰り返します. 最終的に, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new})$ が収束判定条件 (4.1) を満足すれば, (4.1), (4.2) の定常パルス波を数値的に求めたことになります. 最後に (4.6) のヤコビ行列を作る参考プログラムを下記に紹介します.

```

/* a[i][j] にヤコビ行列の各要素を格納する */
/* fu[i], fv[i], gu[i], gv[i] はそれぞれ  $\frac{\partial f}{\partial u_i}(u_i, v_i)$ ,  $\frac{\partial f}{\partial v_i}(u_i, v_i)$ ,  $\frac{\partial g}{\partial u_i}(u_i, v_i)$ ,  $\frac{\partial g}{\partial v_i}(u_i, v_i)$  を表す. */

for( i = 1; i <= N; i++){
  for( j = 1; j <= N; j++){
    if( i-1 == j ){
      a[i ][j ] = Ru; /*1の部分 */
      a[i ][j+N] = 0.0;
      a[i+N][j ] = 0.0;
      a[i+N][j+N] = Rv; /*2の部分 */
    }else if( i == j ){
      a[i ][j ] = - 2.0 * Ru + fu[i]; /*3の部分 */
      a[i ][j+N] = fv[i]; /*4の部分 */
      a[i+N][j ] = gu[i]; /*5の部分 */
      a[i+N][j+N] = - 2.0 * Rv + gv[i]; /*6の部分 */
    }else if( i+1 == j ){
      a[i ][j ] = Ru; /*7の部分 */
      a[i ][j+N] = 0.0;
      a[i+N][j ] = 0.0;
      a[i+N][j+N] = Rv; /*8の部分 */
    }else{
      a[i ][j ] = 0.0;
      a[i ][j+N] = 0.0;
      a[i+N][j ] = 0.0;
      a[i+N][j+N] = 0.0;
    }
  }
}

a[1 ][N ] = Ru; /*9の部分 */
a[N ][1 ] = Ru; /*10の部分 */
a[1+N][N+N] = Rv; /*11の部分 */
a[N+N][1+N] = Rv; /*12の部分 */

```

4.1.1 定常パルス波の安定性

この節では (4.1), (4.2) に対する定常パルス波の数値的な安定性について説明します. いま, $w \equiv {}^t(u, v)$ は (4.5) の解とします. このとき, 差分方程式 (4.3) を解 w の周りで線形化した

(4.6) の $2N \times 2N$ の線形化行列

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

の固有値を調べることによって、定常パルス波の安定性を求めることができます。すなわち、(4.7) の固有値 σ を

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_{2N} \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^{2N}$$

とおいたとき

$$\begin{aligned} |\sigma_i| < 0 \quad \text{for } 1 \leq \forall i \leq 2N & \Rightarrow \text{定常パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は安定解,} \\ |\sigma_i| > 0 \quad \text{for } 1 \leq \exists i \leq 2N & \Rightarrow \text{定常パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は不安定解} \end{aligned}$$

となります。ただし、周期境界条件下での定常パルス波を考えた場合、空間並進性の自由度により必ず0固有値を1つ持ちますが、この固有値は安定性に影響を与えないことがわかっています。

4.1.2 多変数反応拡散系への拡張

前節では2変数反応拡散系の定常パルス波の数値計算法を解説しました。この手法は容易に n 変数反応拡散系

$$\mathbf{D}U_{xx} + \mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}, \quad -L \leq x < L, \quad (4.8)$$

$$\mathbf{U}(-L) = \mathbf{U}(L), \quad \mathbf{U}_x(-L) = \mathbf{U}_x(L). \quad (4.9)$$

に拡張できるので、その解説をします。ただし

$$\mathbf{D} = \text{diag}(d_1, \dots, d_n), \quad \mathbf{U} = {}^t(u_1, \dots, u_n), \quad \mathbf{F} = {}^t(f_1, \dots, f_n)$$

とします。(4.8), (4.9) に対して差分化を行います。区間 $2L$ を N 等分して $\Delta x = 2L/N$ とおき、

$$x_j = -L + (j-1) \times \Delta x, \quad 1 \leq j \leq N,$$

$$u_i(x_j) \equiv u_{i,j}$$

とします。(4.8) に対して中心差分近似を行うと

$$F_{i,j} \equiv d_i \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta x^2} + f_i(\mathbf{u}_j), \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq N.$$

を得ます。ただし

$$\mathbf{u}_j = (u_{1,j}, \dots, u_{n,j}), \quad 1 \leq j \leq N$$

です。また、周期境界条件 (4.9) より

$$\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_N, \quad \mathbf{u}_{N+1} = \mathbf{u}_1$$

を得ます。今、新しい変数を

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_1 &= \begin{pmatrix} u_{1,1} \\ \vdots \\ u_{1,N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_N \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{U}_n = \begin{pmatrix} u_{n,1} \\ \vdots \\ u_{n,N} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_{(n-1) \times N + 1} \\ \vdots \\ w_{n \times N} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{F}_1(\mathbf{w}) &= \begin{pmatrix} F_{1,1}(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ F_{1,N}(\mathbf{w}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_1(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ H_N(\mathbf{w}) \end{pmatrix}, \dots, \mathbf{F}_n(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} F_{n,1}(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ F_{n,N}(\mathbf{w}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{(n-1) \times N + 1}(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ H_{n \times N}(\mathbf{w}) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{w} &= \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{U}_n \end{pmatrix}, \mathbf{H}(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(\mathbf{w}) \\ \vdots \\ \mathbf{F}_n(\mathbf{w}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とおくと、非線形境界値問題 (4.8), (4.9) は連立非線形方程式

$$\mathbf{H}(\mathbf{w}) = \mathbf{0}$$

を解くことに帰着されます。これに対して Newton 法 (Appendix(D.1)) を適用します。このとき、Newton 法による主な計算は連立 1 次方程式

$$\mathbf{DH}(\mathbf{w}) \Delta \mathbf{w} = \mathbf{H}(\mathbf{w}) \quad (4.10)$$

から解 $\Delta \mathbf{w}$ を求めることです。ただし、 $\mathbf{DH}(\mathbf{w})$ はヤコビ行列

$$\mathbf{DH}(\mathbf{w}) = \left(\frac{\partial H_i}{\partial w_j}(\mathbf{w}) \right)_{1 \leq i, j \leq n \times N} \quad (4.11)$$

を表します。

4.2 進行パルス波の数値計算法

この節では 2 変数反応拡散系に対する進行パルス波

$$\begin{cases} d_u u_{zz} + c u_z + f(u, v, \mu_1) = 0, \\ d_v v_{zz} + c v_z + g(u, v, \mu_2) = 0, \end{cases} \quad z \in [-L, L], \quad (4.12)$$

$$(u, v)(-L) = (u, v)(L), \quad (u_z, v_z)(-L) = (u_z, v_z)(L) \quad (4.13)$$

の数値計算法について解説します。今、あるパラメータ $\lambda = \bar{\lambda}$ における解 $(\bar{u}(z), \bar{v}(z), \bar{c}, \bar{\lambda})$ と方向ベクトル $(\dot{u}(z), \dot{v}(z), \dot{c}, \dot{\lambda})$ は求まっているとします。このとき、(4.12), (4.13) に対して位相条件

$$\int_{-L}^L \bar{u}' u dz + \int_{-L}^L \bar{v}' v dz = 0 \quad (4.14)$$

と 擬似弧長法

$$\int_{-L}^L (u - \bar{u}) \dot{u} dz + \int_{-L}^L (v - \bar{v}) \dot{v} dz + (c - \bar{c}) \dot{c} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \quad (4.15)$$

を加えて (u, v, c, λ) を Newton 法を用いて求めます。ここで、 λ は d_u, d_v, μ_1, μ_2 のいずれか 1 つとします。

(4.12)–(4.15) に対して差分化を行います。区間 $2L$ を N 等分して $\Delta z = 2L/N$ とおき、

$$\begin{aligned}
z_i &= -L + (i-1) \times \Delta z, \quad 1 \leq i \leq N, \\
u_i &\equiv u(z_i), \quad \dot{u}_i \equiv \dot{u}(z_i), \\
v_i &\equiv v(z_i), \quad \dot{v}_i \equiv \dot{v}(z_i)
\end{aligned}$$

とします. (4.12) に対し中心差分近似を行うと

$$\begin{cases} F_i \equiv d_u \frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta z^2} + c \frac{u_{i+1} + u_{i-1}}{2\Delta z} + f(u_i, v_i, \mu_1) = 0, & 1 \leq i \leq N, \\ G_i \equiv d_v \frac{v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}}{\Delta z^2} + c \frac{v_{i+1} + v_{i-1}}{2\Delta z} + g(u_i, v_i, \mu_2) = 0, & 1 \leq i \leq N \end{cases} \quad (4.16)$$

を得ます. また, 周期境界条件 (4.13) より

$$\begin{cases} u_0 = u_N, & u_{N+1} = u_1, \\ v_0 = v_N, & v_{N+1} = v_N \end{cases} \quad (4.17)$$

を得ますさらに, 位相条件 (4.14) と 擬似弧長法 (4.15) の積分に対し複合長方形近似を行うと

$$P \equiv \sum_{i=1}^N \left(\frac{\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}}{2\Delta z} u_i \right) \Delta z + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_{i-1}}{2\Delta z} v_i \right) \Delta z = 0, \quad (4.18)$$

$$K \equiv \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta z + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta z + (c - \bar{c}) \dot{c} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \quad (4.19)$$

を得ます. (4.16) と (4.18) を整理すると

$$\begin{cases} F_i = (R_u - R_c) u_{i-1} - 2R_u u_i + (R_u + R_c) u_{i+1} + f(u_i, v_i, \lambda) = 0, \\ G_i = (R_v - R_c) v_{i-1} - 2R_v v_i + (R_v + R_c) v_{i+1} + g(u_i, v_i, \lambda) = 0, \\ P = \sum_{i=1}^N (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}) u_i + \sum_{i=1}^N (\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_{i-1}) v_i = 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

となります. ただし, R_u, R_v, R_c は

$$R_u = \frac{du}{\Delta z^2}, \quad R_v = \frac{dv}{\Delta z^2}, \quad R_c = \frac{c}{2\Delta z}$$

を表します. 従って, (4.17), (4.19), (4.20) より連立非線形方程式

$$\begin{cases} \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) = \mathbf{0}, \\ P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) = 0, \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) = 0 \end{cases} \quad (4.21)$$

が導かれます. ただし

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{pmatrix}, \\ \mathbf{F}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) &= \begin{pmatrix} F_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ F_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) = \begin{pmatrix} G_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ G_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

です. (4.21) に対して Newton 法 (Appendix(D.1)) を適用して, 数値解を求めます. このとき, Newton 法による主な計算は, 連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial c} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial c} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{F} \\ \mathbf{G} \\ P \\ K \end{pmatrix} \quad (4.22)$$

から解 ${}^t(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{v}, \Delta c, \Delta \lambda)$ を求めることになります. ただし,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial c} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\ \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial F_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial c} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial G_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial P}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial P}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \Delta \mathbf{u} &= {}^t(\Delta u_1, \dots, \Delta u_N), & \Delta \mathbf{v} &= {}^t(\Delta v_1, \dots, \Delta v_N) \end{aligned}$$

です。ヤコビ行列を詳しくみていくと

$$\left(\begin{array}{cccccc|cccccc|cc}
 \frac{\partial F_1}{\partial u_1} & \frac{\partial F_1}{\partial u_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial u_N} & \frac{\partial F_1}{\partial v_1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_1}{\partial c} & \frac{\partial F_1}{\partial \lambda} \\
 \frac{\partial F_2}{\partial u_1} & \frac{\partial F_2}{\partial u_2} & \frac{\partial F_2}{\partial u_3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial v_2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_2}{\partial c} & \frac{\partial F_2}{\partial \lambda} \\
 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-2}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial u_N} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & 0 & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial c} & \frac{\partial F_{N-1}}{\partial \lambda} \\
 \frac{\partial F_N}{\partial u_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial F_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial F_N}{\partial u_N} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial F_N}{\partial v_N} & \frac{\partial F_N}{\partial c} & \frac{\partial F_N}{\partial \lambda} \\
 \hline
 \frac{\partial G_1}{\partial u_1} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_1}{\partial v_1} & \frac{\partial G_1}{\partial v_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_1}{\partial v_N} & \frac{\partial G_1}{\partial c} & \frac{\partial G_1}{\partial \lambda} \\
 0 & \frac{\partial G_2}{\partial u_2} & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_2}{\partial v_1} & \frac{\partial G_2}{\partial v_2} & \frac{\partial G_2}{\partial v_3} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_2}{\partial c} & \frac{\partial G_2}{\partial \lambda} \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & \vdots \\
 0 & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_{N-2}} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial v_N} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial c} & \frac{\partial G_{N-1}}{\partial \lambda} \\
 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & \frac{\partial G_N}{\partial u_N} & \frac{\partial G_N}{\partial v_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial G_N}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial G_N}{\partial v_N} & \frac{\partial G_N}{\partial c} & \frac{\partial G_N}{\partial \lambda} \\
 \hline
 \frac{\partial P}{\partial u_1} & \frac{\partial P}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial P}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial P}{\partial u_N} & \frac{\partial P}{\partial v_1} & \frac{\partial P}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial P}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial P}{\partial v_N} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\
 \hline
 \frac{\partial K}{\partial u_1} & \frac{\partial K}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial K}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial K}{\partial u_N} & \frac{\partial K}{\partial v_1} & \frac{\partial K}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial K}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial K}{\partial v_N} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda}
 \end{array} \right)$$

のような形になります。図 4.2 はこの行列を表したもので、図中の各番号に入る要素を下記の表に示します。ただし、 $I = i - N$ 、 $J = j - N$ と置いています。

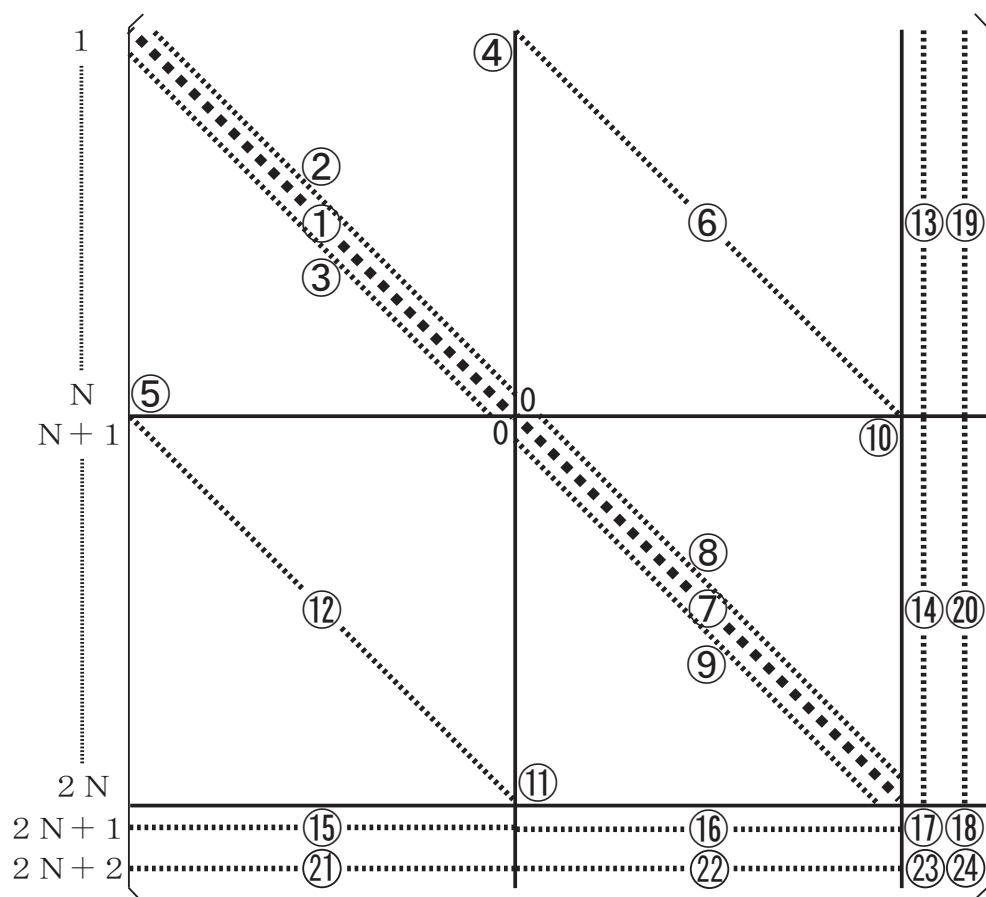


図 4.2: (4.22) のヤコビ行列

番号	i 行	j 列	要素の値
1	$1 \leq i \leq N$	$j = i$	$-2R_u + \frac{\partial f}{\partial u_i}(u_i, v_i, \mu_1)$
2	$1 \leq i \leq N-1$	$j = i+1$	$R_u + R_c$
3	$2 \leq i \leq N$	$j = i-1$	$R_u - R_c$
4	$i = 1$	$j = N$	$R_u - R_c$
5	$i = N$	$j = 1$	$R_u + R_c$
6	$1 \leq i \leq N$	$j = i+N$	$\frac{\partial f}{\partial v_i}(u_i, v_i)$
7	$N+1 \leq i \leq 2N$	$j = i$	$-2R_u + \frac{\partial g}{\partial v_I}(u_I, v_I, \mu_2)$
8	$N+1 \leq i \leq 2N-1$	$j = i+1$	$R_v + R_c$
9	$N+2 \leq i \leq 2N$	$j = i-1$	$R_v - R_c$
10	$i = N+1$	$j = 2N$	$R_v - R_c$
11	$i = 2N$	$j = N+1$	$R_v + R_c$
12	$N+1 \leq i \leq 2N$	$j = i-N$	$\frac{\partial g}{\partial u_I}(u_I, v_I)$
13	$i = 1$	$j = 2N-1$	$\frac{u_{i+1} - u_{i-1+N}}{2\Delta z}$
	$2 \leq i \leq N-1$		$\frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta z}$
	$i = N$		$\frac{u_{i+1-N} - u_{i-1}}{2\Delta z}$
14	$i = N+1$	$j = 2N-1$	$\frac{v_{I+1} - v_{I-1+N}}{2\Delta z}$
	$N+2 \leq i \leq 2N-1$		$\frac{v_{I+1} - v_{I-1}}{2\Delta z}$
	$i = 2N$		$\frac{v_{I+1-N} - v_{I-1}}{2\Delta z}$
15	$i = 2N+1$	$j = 1$	$\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1+N}$
		$2 \leq j \leq N-1$	$\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1}$
		$j = N$	$\bar{u}_{j+1-N} - \bar{u}_{j-1}$
16	$i = 2N+1$	$j = N+1$	$\bar{v}_{J+1} - \bar{v}_{J-1+N}$
		$N+2 \leq j \leq 2N-1$	$\bar{v}_{J+1} - \bar{v}_{J-1}$
		$j = 2N$	$\bar{v}_{J+1-N} - \bar{v}_{J-1}$
17	$i = 2N+1$	$j = 2N+1$	0
18	$i = 2N+1$	$j = 2N+2$	0

番号	i 行		j 列	要素の値
19	$\lambda = d_u$	$i = 1$ $2 \leq i \leq N-1$ $i = N$	$j = 2N+2$	$\frac{u_{i-1+N} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta z^2} + \frac{\partial f}{\partial \lambda}(u_i, v_i, \mu_1)$ $\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}}{\Delta z^2} + \frac{\partial f}{\partial \lambda}(u_i, v_i, \mu_1)$ $\frac{u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1-N}}{\Delta z^2} + \frac{\partial f}{\partial \lambda}(u_i, v_i, \mu_1)$
	$\lambda \neq d_u$	$1 \leq i \leq N$		$\frac{\partial f}{\partial \lambda}(u_i, v_i, \mu_1)$
20	$\lambda = d_v$	$i = N+1$ $N+2 \leq i \leq 2N-1$ $i = 2N$	$j = 2N+2$	$\frac{v_{I-1+N} - 2v_I + v_{I+1}}{\Delta z^2} + \frac{\partial g}{\partial \lambda}(u_I, v_I, \mu_2)$ $\frac{v_{I-1} - 2v_I + v_{I+1}}{\Delta z^2} + \frac{\partial g}{\partial \lambda}(u_I, v_I, \mu_2)$ $\frac{v_{I-1} - 2v_I + v_{I+1-N}}{\Delta z^2} + \frac{\partial g}{\partial \lambda}(u_I, v_I, \mu_2)$
	$\lambda \neq d_v$	$1 \leq i \leq N$		$\frac{\partial g}{\partial \lambda}(u_i, v_i, \mu_2)$
21		$i = 2N+2$	$1 \leq j \leq N$	$\dot{u}_j$
22		$i = 2N+2$	$N+1 \leq j \leq 2N$	$\dot{v}_j$
23		$i = 2N+2$	$j = 2N+1$	$\dot{c}$
24		$i = 2N+2$	$j = 2N+2$	$\dot{\lambda}$

また (4.22) の右辺は

$$\begin{pmatrix} F_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ F_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ F_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ G_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ G_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ \vdots \\ G_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (R_u - R_c)u_{1-1+N} - 2R_u u_1 + (R_u + R_c)u_2 + f(u_1, v_1, \mu_1) \\ \vdots \\ (R_u - R_c)u_{i-1} - 2R_u u_i + (R_u + R_c)u_{i+1} + f(u_i, v_i, \mu_1) \\ \vdots \\ (R_u - R_c)u_{N-1} - 2R_u u_N + (R_u + R_c)u_{N+1-N} + f(u_N, v_N, \mu_1) \\ (R_v - R_c)v_{1-1+N} - 2R_v v_1 + (R_v + R_c)v_2 + g(u_1, v_1, \mu_2) \\ \vdots \\ (R_v - R_c)v_{i-1} - 2R_v v_i + (R_v + R_c)v_{i+1} + g(u_i, v_i, \mu_2) \\ \vdots \\ (R_v - R_c)v_{N-1} - 2R_v v_N + (R_v + R_c)v_{N+1-N} + g(u_N, v_N, \mu_2) \\ \sum_{i=1}^N (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}) u_i + \sum_{i=1}^N (\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_{i-1}) v_i \\ \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta z + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta z + (c - \bar{c})\dot{c} + (\lambda - \bar{\lambda})\dot{\lambda} - \Delta s \end{pmatrix}$$

となります。この場合、ヤコビ行列は密行列となり前節の ILUCGS 法は適用できないので、ヤコビ行列が密行列でも対応できるような一般の係数行列をもつ場合の LU 分解法で求めます。または、第 2 章で紹介した方法を用いて高速に計算します。一般的な方法は Appendix E を参照してください。

これより, (4.22) のヤコビ行列, 右辺を求めたのち, 連立 1 次方程式 (4.22) を解くことになります. 次に, この連立 1 次方程式から求まる解に対し

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{new} \\ \mathbf{v}_{new} \\ c_{new} \\ \lambda_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ c \\ \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix}$$

において, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が (4.21) の解を近似的に満たしているか収束判定条件

$$\sum_{i=1}^{2N+2} \|H_i\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N F_i^2 + \sum_{i=1}^N G_i^2 + c^2 + \lambda^2} \leq (2N+2)\varepsilon. \quad (4.23)$$

から行います. ただし, ε は十分小さな値とします. このとき, 解 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.23) を満たさなければ ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ を ${}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda)$ とおいて, 再び (4.22) のヤコビ行列, 右辺を作り直し, 同じ作業を繰り返すことになります. 数回反復したのち, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.23) を満たしたならば, (4.21) の解が求まったことになり, 次の解を求めるために方向ベクトルを求めます. 方向ベクトルの計算は連立方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial c} & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial c} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial c} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}}_{new} \\ \dot{\mathbf{v}}_{new} \\ \dot{c}_{new} \\ \dot{\lambda}_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を解いて ${}^t(\dot{\mathbf{u}}_{new}, \dot{\mathbf{v}}_{new}, \dot{c}_{new}, \dot{\lambda}_{new})$ を 1 に正規化して求めます. 以上の手続きから, パラメータを変化させながら (4.12), (4.13) の進行パルス波を数値的に求めることができます. ここまでは, 主に進行パルス波の数値計算を扱ってきましたが, フロント波の数値計算も同じような計算で求めることができます. フロント波の数値計算をする場合, 境界条件を斉次ノイマン境界条件として与え¹ 空間に対する Phase Condition (位相条件) として, Appendix A に書かれている (A.1) か (A.6) を用います. このとき, パルス波のときと同じように離散化すると $(2N+3) \times (2N+3)$ 行列をもつ連立 1 次方程式を解くことになります. ただし, 位相条件として (A.1) を用いた場合, $(2N+2) \times (2N+2)$ 行列をもつ連立方程式を解くことになります. ここでは, フロント波の具体的な数値計算法は省略します.

4.2.1 進行パルス波の安定性

この節では (4.12), (4.13) に対する進行パルス波の数値的な安定性について説明します. いま, $\mathbf{w} \equiv {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, c, \lambda)$ は (4.21) の解とします. このとき, 進行パルス波の安定性は定常パルス波の安

¹ 斉次ノイマン境界条件は $\frac{\partial u}{\partial z}(0) = \frac{\partial u}{\partial z}(L) = 0$, $\frac{\partial v}{\partial z}(0) = \frac{\partial v}{\partial z}(L)$ とおけば良い.

定性と同様に (4.22) の $2N \times 2N$ の線形化行列

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \\ \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

の固有値を調べることで決定します. すなわち, (4.24) の固有値 σ を

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_{2N} \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^{2N}$$

とおいたとき

$$\begin{aligned} |\sigma_i| < 0 \quad \text{for } 1 \leq \forall i \leq 2N & \Rightarrow \text{進行パルス波 } \mathbf{u}, \mathbf{v} \text{ は安定解,} \\ |\sigma_i| > 0 \quad \text{for } 1 \leq \exists i \leq 2N & \Rightarrow \text{進行パルス波 } \mathbf{u}, \mathbf{v} \text{ は不安定解} \end{aligned}$$

となります. ただし, 周期境界条件による進行パルス波を考える場合, 空間並進性の自由度により必ず 0 固有値を 1 つ持ちますが, この固有値は安定性に影響を与えないことがわかっています.

4.3 脈動定常パルス波の数値計算法

この節では 2 変数反応拡散系に対する脈動定常パルス波

$$\begin{cases} u_t = d_u u_{xx} + f(u, v, \mu_1), \\ v_t = d_v v_{xx} + g(u, v, \mu_2), \end{cases} \quad t \in [0, T], \quad x \in [-L, L], \quad (4.25)$$

$$(u, v)(0, x) = (u, v)(T, x), \quad (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \quad (u_x, v_x)(t, -L) = (u_x, v_x)(t, L) \quad (4.26)$$

の数値計算法について解説します. (4.25), (4.26) に対し $\tau = \frac{t}{T}$ と変数変換を行い, τ を改めて t とおくと

$$\begin{cases} u_t = T(d_u u_{xx} + f(u, v, \mu_1)) \equiv TF(u, v, \lambda_1), \\ v_t = T(d_v v_{xx} + g(u, v, \mu_2)) \equiv TG(u, v, \lambda_2), \end{cases} \quad t \in [0, 1], \quad x \in [-L, L], \quad (4.27)$$

$$(u, v)(0, x) = (u, v)(1, x), \quad (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \quad (u_x, v_x)(t, -L) = (u_x, v_x)(t, L) \quad (4.28)$$

を得えます. ただし, λ_1 は d_u, μ_1 のどちらかであり, λ_2 は d_v, μ_2 のどちらかです. このとき, 初期関数 $u_0(x), v_0(x)$ に対する (4.27), (4.28) の時間発展解を

$$(u(t, x), v(t, x)) = (\phi(t, x; u_0, v_0, T, \lambda), \psi(t, x; u_0, v_0, T, \lambda))$$

とおきます. ここで, λ は λ_1, λ_2 のどちらかとします. このとき, ϕ, ψ が周期解であるためには

$$\begin{cases} u(0, x) = u(1, x), \\ v(0, x) = v(1, x) \end{cases}$$

より

$$\begin{cases} \phi(1, x; u_0, v_0, T, \lambda) - u_0 = 0, \\ \psi(1, x; u_0, v_0, T, \lambda) - v_0 = 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

を得ます. いま, あるパラメータ $\lambda = \bar{\lambda}$ における解 $(\bar{u}(t, x), \bar{v}(t, x), \bar{T}, \bar{\lambda})$ と方向ベクトル $(\dot{u}_0(x), \dot{v}_0(x), \dot{T}, \dot{\lambda})$ は求まっているとします. このとき, (4.29) に対して時間方向の位相条件

$$\int_0^1 \int_{-L}^L F(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}_1) u dx dt + \int_0^1 \int_{-L}^L G(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}_2) v dx dt = 0 \quad (4.30)$$

と 擬似弧長法

$$\int_{-L}^L (u_0 - \bar{u}_0) \dot{u}_0 dx + \int_{-L}^L (v_0 - \bar{v}_0) \dot{v}_0 dx + (T - \bar{T}) \dot{T} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \quad (4.31)$$

を加えて, 未知変数 (u_0, v_0, T, λ) を Newton 法によって数値的に解きます. (4.29)–(4.31) に対して差分化を行います. 時間周期 1 を M 等分, 区間 $2L$ を N 等分して $\Delta t = 1/M$, $\Delta x = 2L/N$ とおき

$$t_k = (k-1) \times \Delta t, \quad 1 \leq k \leq M+1,$$

$$x_i = -L + (i-1) \times \Delta x, \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$u_i \equiv u_0(x_i), \quad \mathbf{u} \equiv {}^t(u_1 \cdots u_N), \quad \phi_i^k \equiv \phi(t_k, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda), \quad \text{特に } \phi_i \equiv \phi_i^{M+1},$$

$$v_i \equiv v_0(x_i), \quad \mathbf{v} \equiv {}^t(v_1 \cdots v_N), \quad \psi_i^k \equiv \psi(t_k, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda), \quad \text{特に } \psi_i \equiv \psi_i^{M+1},$$

$$\bar{F}_i^k \equiv F(\bar{u}(t_k, x_i), \bar{v}(t_k, x_i), \bar{\lambda}_1), \quad \dot{u}_i \equiv \dot{u}_0(x_i),$$

$$\bar{G}_i^k \equiv G(\bar{u}(t_k, x_i), \bar{v}(t_k, x_i), \bar{\lambda}_2), \quad \dot{v}_i \equiv \dot{v}_0(x_i)$$

とします. このとき (4.29)–(4.31) は

$$\begin{cases} \Phi_i \equiv \phi_i - u_i = 0, & 1 \leq i \leq N, \\ \Psi_i \equiv \psi_i - v_i = 0, & 1 \leq i \leq N, \\ P \equiv \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{F}_i^k \phi_i^k + \bar{F}_i^{k+1} \phi_i^{k+1}) + \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{G}_i^k \psi_i^k + \bar{G}_i^{k+1} \psi_i^{k+1}) = 0, \\ K \equiv \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta x + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta x + (T - \bar{T}) \dot{T} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \end{cases} \quad (4.32)$$

となります. ただし, 位相条件と擬似弧長法に対する差分化は, 時間方向の積分に対し台形公式で近似し, 空間方向の積分に対し長方形近似した後に, 式を整理しています. 従って, (4.32) より連立非線形方程式

$$\begin{cases} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = \mathbf{0}, \\ \Psi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = \mathbf{0}, \\ P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = 0, \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = 0 \end{cases} \quad (4.33)$$

が導かれます。ただし

$$\Phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \end{pmatrix}, \quad \Psi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \end{pmatrix}$$

です。(4.33) に対して Newton 法 (Appendix(D.1)) を適用します。このとき、Newton 法による主な計算は連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta T \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Psi \\ P \\ K \end{pmatrix} \quad (4.34)$$

から解 ${}^t(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{v}, T, \lambda)$ を求めることです。ただし

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \Phi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \frac{\partial \Psi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial P}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial P}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \Delta \mathbf{u} &= {}^t(\Delta u_1, \dots, \Delta u_N), & \Delta \mathbf{v} &= {}^t(\Delta v_1, \dots, \Delta v_N) \end{aligned}$$

です。ヤコビ行列は

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \phi}{\partial T} & \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \psi}{\partial T} & \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.35)$$

と書けます ただし

$$\begin{aligned}
\phi &= {}^t(\phi_1, \dots, \phi_N), & \psi &= {}^t(\psi_1, \dots, \psi_N), \\
\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \phi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\
\frac{\partial \phi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\
\frac{\partial \psi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}
\end{aligned}$$

で, I は単位行列を表します. (4.35) の右辺第 1 項を詳しくみていくと

$$\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc|cc|cc|cc}
\frac{\partial \phi_1}{\partial u_1} & \frac{\partial \phi_1}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_1}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \phi_1}{\partial u_N} & \frac{\partial \phi_1}{\partial v_1} & \frac{\partial \phi_1}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_1}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \phi_1}{\partial v_N} & \frac{\partial \phi_1}{\partial T} & \frac{\partial \phi_1}{\partial \lambda} \\
\frac{\partial \phi_2}{\partial u_1} & \frac{\partial \phi_2}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_2}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \phi_2}{\partial u_N} & \frac{\partial \phi_2}{\partial v_1} & \frac{\partial \phi_2}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_2}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \phi_2}{\partial v_N} & \frac{\partial \phi_2}{\partial T} & \frac{\partial \phi_2}{\partial \lambda} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial u_1} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial u_N} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial v_1} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial v_N} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial T} & \frac{\partial \phi_{N-1}}{\partial \lambda} \\
\frac{\partial \psi_N}{\partial u_1} & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_N} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_1} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_N} & \frac{\partial \psi_N}{\partial T} & \frac{\partial \psi_N}{\partial \lambda} \\
\hline
\frac{\partial \psi_1}{\partial u_1} & \frac{\partial \psi_1}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_1}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \psi_1}{\partial u_N} & \frac{\partial \psi_1}{\partial v_1} & \frac{\partial \psi_1}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_1}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \psi_1}{\partial v_N} & \frac{\partial \psi_1}{\partial T} & \frac{\partial \psi_1}{\partial \lambda} \\
\frac{\partial \psi_2}{\partial u_1} & \frac{\partial \psi_2}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_2}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \psi_2}{\partial u_N} & \frac{\partial \psi_2}{\partial v_1} & \frac{\partial \psi_2}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_2}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \psi_2}{\partial v_N} & \frac{\partial \psi_2}{\partial T} & \frac{\partial \psi_2}{\partial \lambda} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
\frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial u_1} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial u_N} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial v_1} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial v_N} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial T} & \frac{\partial \psi_{N-1}}{\partial \lambda} \\
\frac{\partial \psi_N}{\partial u_1} & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial \psi_N}{\partial u_N} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_1} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial \psi_N}{\partial v_N} & \frac{\partial \psi_N}{\partial T} & \frac{\partial \psi_N}{\partial \lambda} \\
\hline
\frac{\partial P}{\partial u_1} & \frac{\partial P}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial P}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial P}{\partial u_N} & \frac{\partial P}{\partial v_1} & \frac{\partial P}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial P}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial P}{\partial v_N} & \frac{\partial P}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\
\hline
\frac{\partial K}{\partial u_1} & \frac{\partial K}{\partial u_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial K}{\partial u_{N-1}} & \frac{\partial K}{\partial u_N} & \frac{\partial K}{\partial v_1} & \frac{\partial K}{\partial v_2} & \cdots & \cdots & \frac{\partial K}{\partial v_{N-1}} & \frac{\partial K}{\partial v_N} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial \lambda}
\end{array} \right)$$

のような密行列の形になります.

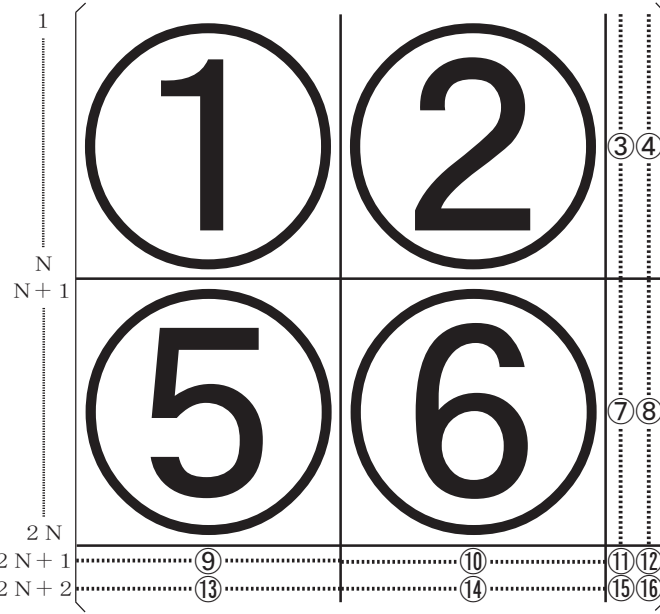


図 4.3: (4.35) の右辺第 1 項の行列

次に、この密行列の要素を具体的に見ていきます。図 4.3 はこの密行列を表したもので、図中の各番号に入る要素を下記の表に示します。ただし、 $I = i - N$, $J = j - N$ とおき、次のような変数を定義をしています。

$$\delta_1 = \begin{pmatrix} \delta \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \delta_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ \delta \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \delta_N = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ \delta \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

ここで、 δ は十分小さな値とします。

番号	i 行	j 列	要素の値
1	$1 \leq i \leq N$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\partial \phi_i}{\partial u_j} = \frac{\phi(1, x_i; \mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, \lambda) - \phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
2		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\partial \phi_i}{\partial v_J} = \frac{\phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, \lambda) - \phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
3		$j = 2N+1$	$\frac{\partial \phi_i}{\partial T} = \frac{\phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, \lambda) - \phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
4		$j = 2N+2$	$\frac{\partial \phi_i}{\partial \lambda} = \frac{\phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda + \delta) - \phi(1, x_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
5	$N+1 \leq i \leq 2N$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\partial \psi_I}{\partial u_j} = \frac{\psi(1, x_I; \mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, \lambda) - \psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
6		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\partial \psi_I}{\partial v_J} = \frac{\psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, \lambda) - \psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
7		$j = 2N+1$	$\frac{\partial \psi_I}{\partial T} = \frac{\psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, \lambda) - \psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
8		$j = 2N+2$	$\frac{\partial \psi_I}{\partial \lambda} = \frac{\psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda + \delta) - \psi(1, x_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
9	$i = 2N+1$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\partial P}{\partial u_j} = \frac{P(\mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, \lambda) - P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
10		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\partial P}{\partial v_j} = \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, \lambda) - P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
11		$j = 2N+1$	$\frac{\partial P}{\partial T} = \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, \lambda) - P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
12		$j = 2N+2$	$\frac{\partial P}{\partial \lambda} = \frac{P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda + \delta) - P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)}{\delta}$
13	$i = 2N+2$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\partial K}{\partial u_j} = \dot{u}_j$
14		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\partial K}{\partial v_J} = \dot{v}_J$
15		$j = 2N+1$	$\frac{\partial K}{\partial T} = \dot{T}$
16		$j = 2N+2$	$\frac{\partial K}{\partial \lambda} = \dot{\lambda}$

また (4.34) の右辺は

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \Psi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ P(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1 - u_1 \\ \vdots \\ \phi_i - u_i \\ \vdots \\ \phi_N - u_N \\ \psi_1 - v_1 \\ \vdots \\ \psi_i - v_i \\ \vdots \\ \psi_N - v_N \\ \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{F}_i^k \phi_i^k + \bar{F}_i^{k+1} \phi_i^{k+1}) + \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{G}_i^k \psi_i^k + \bar{G}_i^{k+1} \psi_i^{k+1}) \\ \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta x + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta x + (T - \bar{T}) \dot{T} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s \end{pmatrix}$$

となります。 $\phi(t, x; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)$, $\psi(t, x; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)$ の数値解は差分法による発展方程式 (4.27), (4.28) の数値計算から求まる時間発展解を採用します。 (4.27) に対する差分スキームは次のように与えればよい：

$$\begin{cases} -R_u u_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_u) u_i^{k+1} - R_u u_{i+1}^{k+1} = u_i^k + T f(u_i, v_i, \mu_1), & 1 \leq i \leq N, \\ -R_v v_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_v) v_i^{k+1} - R_v v_{i+1}^{k+1} = v_i^k + T g(u_i, v_i, \mu_2), & 1 \leq i \leq N. \end{cases}$$

ただし, R_u , R_v は

$$R_u = T \frac{du}{\Delta x^2}, \quad R_v = T \frac{dv}{\Delta x^2}$$

です。この差分法による発展方程式の数値計算法は Appendix(C) で解説しています。これより, (4.34) のヤコビ行列, 右辺を求めてから, 連立 1 次方程式 (4.34) を密行列でも対応できるような LU 分解法を用いて解くことになります。次に, この連立 1 次方程式から求まる解に対し

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{new} \\ \mathbf{v}_{new} \\ T_{new} \\ \lambda_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ T \\ \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta T \\ \Delta \lambda \end{pmatrix}$$

とにおいて, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, \lambda_{new})$ が (4.33) の解を満たすかどうか収束判定条件

$$\sum_{i=1}^{2N+2} \|H_i\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N \Phi_i^2 + \sum_{i=1}^N \Psi_i^2 + T^2 + \lambda^2} \leq (2N+2)\varepsilon \quad (4.37)$$

を用いて行います。ただし, ε は十分小さな値です。このとき, 解 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.37) を満たさなければ

${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, \lambda_{new})$ を ${}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)$ とおいて, (4.34) のヤコビ行列, 右辺を作り直し, 同じ作業を繰り返します。

近似解 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.37) を満たしたらそれを解として、次の解を求めるために方向ベクトル ${}^t(\dot{\mathbf{u}}, \dot{\mathbf{v}}, \dot{T}, \dot{\lambda})$ を求めます。方向ベクトルの計算は、連立方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P}{\partial T} & \frac{\partial P}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}}_{new} \\ \dot{\mathbf{v}}_{new} \\ \dot{T}_{new} \\ \dot{\lambda}_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を解いて、 ${}^t(\dot{\mathbf{u}}_{new}, \dot{\mathbf{v}}_{new}, \dot{T}_{new}, \dot{\lambda}_{new})$ を 1 に正規化して求めます。以上の手続きから、パラメータを変化させながら (4.25), (4.26) の脈動定常パルス波を数値的に求めることができます。

4.3.1 脈動定常パルス波の安定性 [21, 27]

この節では (4.27), (4.28) に対する脈動定常パルス波の数値的な安定性について説明します。いま、 $\mathbf{w} \equiv {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda)$ は (4.33) の解とする。このとき、(4.34) の右辺第 1 項の $2N \times 2N$ 行列

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \\ \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \end{pmatrix}$$

を Monodromy Matrix と呼び、脈動定常パルス波の安定性はこの Monodromy Matrix の固有値を調べることで決定します。すなわち、固有値 σ を

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_{2N} \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^{2N}$$

とおいたとき

$$\begin{aligned} |\sigma_i| < 1 \quad for \quad 1 \leq \forall i \leq 2N & \Rightarrow \text{脈動定常パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は安定解,} \\ |\sigma_i| > 1 \quad for \quad 1 \leq \exists i \leq 2N & \Rightarrow \text{脈動定常パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は不安定解} \end{aligned}$$

となります。Monodromy Matrix は必ず

$$\text{Re } \sigma_i = 1, \quad \text{Im } \sigma_i = 0, \quad 1 \leq \exists i \leq 2N$$

となる固有値を 1 つ持ちますが、この固有値は脈動定常パルス波の安定性に影響を与えないことがわかっています。

4.4 脈動進行パルス波の数値計算法

この節では定義??で与えられた2変数反応拡散系

$$\begin{cases} u_t = d_u u_{zz} + c u_z + f(u, v, \mu_1), \\ v_t = d_v v_{zz} + c v_z + g(u, v, \mu_2), \end{cases} \quad t \in [0, T), \quad z \in [-L, L), \quad (4.38)$$

$$(u, v)(0, z) = (u, v)(T, z), \quad (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \quad (u_z, v_z)(t, -L) = (u_z, v_z)(t, L) \quad (4.39)$$

に対する脈動進行パルス波の数値計算法について解説します. (4.38), (4.39) に対し $\tau = \frac{t}{T}$ と変数変換を行い, τ を改めて t とおくと

$$\begin{cases} u_t = T(d_u u_{zz} + c u_z + f(u, v, \mu_1)) \equiv T F(u, v, \lambda_1), \\ v_t = T(d_v v_{zz} + c v_z + g(u, v, \mu_2)) \equiv T G(u, v, \lambda_2), \end{cases} \quad t \in [0, 1), \quad z \in [-L, L), \quad (4.40)$$

$$(u, v)(0, z) = (u, v)(1, z), \quad (u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \quad (u_z, v_z)(t, -L) = (u_z, v_z)(t, L) \quad (4.41)$$

を得ます. ただし, λ_1 は d_u, μ_1 のどちらかであり, λ_2 は d_v, μ_2 のどちらかです. このとき, 初期関数 $u_0(z), v_0(z)$ に対する (4.40), (4.41) の時間発展解を

$$(u(t, z), v(t, z)) = (\phi(t, z; u_0, v_0, T, c, \lambda), \psi(t, z; u_0, v_0, T, c, \lambda))$$

とおきます. ここで, λ は λ_1, λ_2 のどちらかです.

$$\begin{cases} u(0, z) = u(1, z), \\ v(0, z) = v(1, z) \end{cases}$$

から, ϕ, ψ が周期解となる条件として

$$\begin{cases} \phi(1, z; u_0, v_0, T, c, \lambda) - u_0 = 0, \\ \psi(1, z; u_0, v_0, T, c, \lambda) - v_0 = 0 \end{cases} \quad (4.42)$$

を得ます. いま, あるパラメータ $\lambda = \bar{\lambda}$ における解 $(\bar{u}(t, z), \bar{v}(t, z), \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda})$ と方向ベクトル $(\dot{u}_0, \dot{v}_0, \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ が求まっていると仮定します. このとき, (4.42) に対して時間に対する位相条件

$$\int_0^1 \int_{-L}^L F(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}_1) u dz dt + \int_0^1 \int_{-L}^L G(\bar{u}, \bar{v}, \bar{\lambda}_2) v dz dt = 0 \quad (4.43)$$

と空間に対する位相条件

$$\int_{-L}^L \bar{u}'_0 u_0 dz + \int_{-L}^L \bar{v}'_0 v_0 dz = 0 \quad (4.44)$$

および擬似弧長法

$$\int_{-L}^L (u_0 - \bar{u}_0) \dot{u}_0 dz + \int_{-L}^L (v_0 - \bar{v}_0) \dot{v}_0 dz + (T - \bar{T}) \dot{T} + (c - \bar{c}) \dot{c} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \quad (4.45)$$

を加えて, 方程式系 (4.42) – (4.45) の解 $(u_0, v_0, T, c, \lambda)$ の数値解を Newton 法を用いて解きます

まず, (4.42)–(4.45) に対して差分化を行う. 時間周期 1 を M 等分, 区間 $2L$ を N 等分して $\Delta t = 1/M$, $\Delta z = 2L/N$ とおき

$$\begin{aligned} t_k &= (k-1) \times \Delta t, \quad 1 \leq k \leq M+1, \\ z_i &= -L + (i-1) \times \Delta z, \quad 1 \leq i \leq N, \\ u_i &\equiv u_0(z_i), \quad \mathbf{u} \equiv {}^t(u_1 \cdots u_N), \quad \phi_i^k \equiv \phi(t_k, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda), \quad \text{特に } \phi_i \equiv \phi_i^{M+1}, \\ v_i &\equiv v_0(z_i), \quad \mathbf{v} \equiv {}^t(v_1 \cdots v_N), \quad \psi_i^k \equiv \phi(t_k, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, \lambda), \quad \text{特に } \psi_i \equiv \psi_i^{M+1}, \\ \bar{F}_i^k &\equiv F(\bar{u}(t_k, z_i), \bar{v}(t_k, z_i), \bar{\lambda}_1), \quad \dot{u}_i \equiv \dot{u}_0(z_i), \\ \bar{G}_i^k &\equiv G(\bar{u}(t_k, z_i), \bar{v}(t_k, z_i), \bar{\lambda}_2), \quad \dot{v}_i \equiv \dot{v}_0(z_i) \end{aligned}$$

とします. このとき (4.42)–(4.45) は

$$\left\{ \begin{aligned} \Phi_i &\equiv \phi_i - u_i = 0, \quad 1 \leq i \leq N, \\ \Psi_i &\equiv \psi_i - v_i = 0, \quad 1 \leq i \leq N, \\ P_1 &\equiv \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{F}_i^k \phi_i^k + \bar{F}_i^{k+1} \phi_i^{k+1}) + \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{G}_i^k \psi_i^k + \bar{G}_i^{k+1} \psi_i^{k+1}) = 0, \\ P_2 &\equiv \sum_{i=1}^N (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}) u_i + \sum_{i=1}^N (\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_{i-1}) v_i = 0, \\ K &\equiv \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta z + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta z + (T - \bar{T}) \dot{T} \\ &\quad + (c - \bar{c}) \dot{c} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s = 0 \end{aligned} \right. \quad (4.46)$$

となります. ただし, 時空間に対する位相条件と擬似弧長法に対する差分化は時間方向の積分に対し台形公式で空間方向の積分に対し長方形近似を用いて導き, その後式を整理しています. 従って, (4.46) より連立非線形方程式

$$\left\{ \begin{aligned} \Phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) &= \mathbf{0}, \\ \Psi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) &= \mathbf{0}, \\ P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) &= 0, \\ P_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) &= 0, \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) &= 0 \end{aligned} \right. \quad (4.47)$$

が導かれます. ただし

$$\Phi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) = \begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \end{pmatrix}, \quad \Psi(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \end{pmatrix}$$

です.

(4.47) に対して Newton 法 (Appendix(D.1)) を適用します. このとき, Newton 法による主な計算は連立 1 次方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial c} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} & \frac{\partial P_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} & \frac{\partial P_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta T \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Phi \\ \Psi \\ P_1 \\ P_2 \\ K \end{pmatrix} \quad (4.48)$$

から解 ${}^t(\Delta \mathbf{u}, \Delta \mathbf{v}, T, c, \lambda)$ を求めることです. ただし

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Phi}{\partial c} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \Phi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\ \frac{\partial \Psi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial c} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \Psi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial P_1}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial P_1}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial P_2}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial P_2}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial u_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial K}{\partial v_j} \right)_{1 \leq j \leq N}, \\ \Delta \mathbf{u} &= {}^t(\Delta u_1, \dots, \Delta u_N), & \Delta \mathbf{v} &= {}^t(\Delta v_1, \dots, \Delta v_N) \end{aligned}$$

です.

また、ヤコビ行列は

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial c} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} & \frac{\partial P_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} & \frac{\partial P_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \phi}{\partial T} & \frac{\partial \phi}{\partial c} & \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \psi}{\partial T} & \frac{\partial \psi}{\partial c} & \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} & \frac{\partial P_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} & \frac{\partial P_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} I & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.49)
\end{aligned}$$

と書けます。ただし

$$\begin{aligned}
\phi &= {}^t(\phi_1, \dots, \phi_N), & \psi &= {}^t(\psi_1, \dots, \psi_N), \\
\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\
\frac{\partial \phi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \phi}{\partial c} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \phi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}, \\
\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial u_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial v_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}, \\
\frac{\partial \psi}{\partial T} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial T} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial c} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial c} \right)_{1 \leq i \leq N}, & \frac{\partial \psi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial \psi_i}{\partial \lambda} \right)_{1 \leq i \leq N}
\end{aligned}$$

であり、 I は単位行列を表します。

(4.49) の右辺第 1 項を詳しくみていくと

[illegible]

のような密行列の形になります.

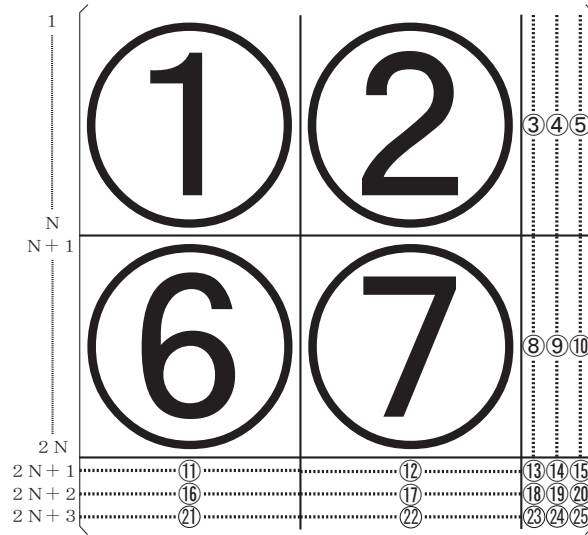


図 4.4: (4.49) の右辺第 1 項の行列

この密行列の要素を具体的にみていきます. 図 4.4 はこの密行列を表したもので, 図中の各番号に入る要素を下記の表に示します. ただし, $I = i - N$, $J = j - N$ とおき, 変数 (4.36) を用います.

番号	i 行	j 列	要素の値
1	$1 \leq i \leq N$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\phi(1, z_i; \mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, c, \lambda) - \phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
2		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, c, \lambda) - \phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
3		$j = 2N+1$	$\frac{\phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, c, \lambda) - \phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
4		$j = 2N+1$	$\frac{\phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c + \delta, \lambda) - \phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
5		$j = 2N+2$	$\frac{\phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda + \delta) - \phi(1, z_i; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
6	$N+1 \leq i \leq 2N$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{\psi(1, z_I; \mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, c, \lambda) - \psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
7		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{\psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, c, \lambda) - \psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
8		$j = 2N+1$	$\frac{\psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, c, \lambda) - \psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
9		$j = 2N+1$	$\frac{\psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c + \delta, \lambda) - \psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
10		$j = 2N+2$	$\frac{\psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda + \delta) - \psi(1, z_I; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
11	$i = 2N+1$	$1 \leq j \leq N$	$\frac{P_1(\mathbf{u} + \boldsymbol{\delta}_j, \mathbf{v}, T, c, \lambda) - P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
12		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\frac{P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v} + \boldsymbol{\delta}_J, T, c, \lambda) - P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
13		$j = 2N+1$	$\frac{P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T + \delta, c, \lambda) - P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
14		$j = 2N+1$	$\frac{P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c + \delta, \lambda) - P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$
15		$j = 2N+2$	$\frac{P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda + \delta) - P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)}{\delta}$

番号	i 行	j 列	要素の値
16	$i = 2N+2$	$j = 1$	$\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1+N}$
		$2 \leq j \leq N-1$	$\bar{u}_{j+1} - \bar{u}_{j-1}$
		$j = N$	$\bar{u}_{j+1-N} - \bar{u}_{j-1}$
17		$j = N+1$	$\bar{u}_{J+1} - \bar{u}_{J-1+N}$
		$N+2 \leq j \leq 2N-1$	$\bar{u}_{J+1} - \bar{u}_{J-1}$
		$j = 2N$	$\bar{u}_{J+1-N} - \bar{u}_{J-1}$
18		$j = 2N+1$	0
19		$j = 2N+1$	0
20		$j = 2N+2$	0
21	$i = 2N+3$	$1 \leq j \leq N$	$\dot{u}_j$
22		$N+1 \leq j \leq 2N$	$\dot{v}_J$
23		$j = 2N+1$	$\dot{T}$
24		$j = 2N+1$	$\dot{c}$
25		$j = 2N+2$	$\dot{\lambda}$

また, (4.48) の右辺は

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Phi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \Psi_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_i(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ \vdots \\ \Psi_N(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ P_1(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ P_2(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \\ K(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_1 - u_1 \\ \vdots \\ \phi_i - u_i \\ \vdots \\ \phi_N - u_N \\ \psi_1 - v_1 \\ \vdots \\ \psi_i - v_i \\ \vdots \\ \psi_N - v_N \\ \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{F}_i^k \phi_i^k + \bar{F}_i^{k+1} \phi_i^{k+1}) + \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N (\bar{G}_i^k \psi_i^k + \bar{G}_i^{k+1} \psi_i^{k+1}) \\ \sum_{i=1}^N (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}) u_i + \sum_{i=1}^N (\bar{v}_{i+1} - \bar{v}_{i-1}) v_i \\ \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u}_i) \dot{u}_i \Delta z + \sum_{i=1}^N (v_i - \bar{v}_i) \dot{v}_i \Delta z + (T - \bar{T}) \dot{T} + (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - \Delta s \end{pmatrix}$$

となります. $\phi(t, z; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)$, $\psi(t, z; \mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)$ の数値解は差分法による発展方程式 (4.40), (4.41) の数値計算から求まる時間発展解を採用します. (4.40) に対する差分スキームは次のように与えることができます:

$$\begin{cases} -R_u u_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_u) u_i^{k+1} - R_u u_{i+1}^{k+1} = R_c u_{i-1}^k + u_i^k - R_c u_{i+1}^k + T f(u_i, v_i, \mu_1), & 1 \leq i \leq N, \\ -R_v v_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_v) v_i^{k+1} - R_v v_{i+1}^{k+1} = R_c v_{i-1}^k + v_i^k - R_c v_{i+1}^k + T g(u_i, v_i, \mu_2), & 1 \leq i \leq N. \end{cases}$$

ただし, R_u, R_v, R_c は $R_u = T \frac{du}{\Delta z^2}, \quad R_v = T \frac{dv}{\Delta z^2}, \quad R_c = T \frac{c}{2\Delta z}$

です. この差分法による発展方程式の数値計算法は Appendix(C) で解説しています. これより, (4.48) のヤコビ行列と右辺を求め, 連立 1 次方程式 (4.48) を密行列でも対応できるような LU 分解法を用いて解くことになります. 次に, この連立 1 次方程式から求まる解に対し

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u}_{new} \\ \mathbf{v}_{new} \\ T_{new} \\ c_{new} \\ \lambda_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \\ T \\ c \\ \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta \mathbf{v} \\ \Delta T \\ \Delta c \\ \Delta \lambda \end{pmatrix}$$

とにおいて, ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が (4.47) の解を満たすかどうか収束判定条件

$$\sum_{i=1}^{2N+3} \|H_i\| = \sqrt{\sum_{i=1}^N \Phi_i^2 + \sum_{i=1}^N \Psi_i^2 + T^2 + c^2 + \lambda^2} \leq (2N+3)\varepsilon \quad (4.50)$$

を用いて判定します。ただし、 ε は十分小さな値とします。このとき、解 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.50) を満たさなければ、 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ を ${}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)$ とおいて (4.48) のヤコビ行列と右辺を作り直し同じ作業を繰り返すことになります。 ${}^t(\mathbf{u}_{new}, \mathbf{v}_{new}, T_{new}, c_{new}, \lambda_{new})$ が収束判定条件 (4.50) を満足すれば、これを近似解とします。そして、次の解を求めるために方向ベクトル ${}^t(\dot{\mathbf{u}}, \dot{\mathbf{v}}, \dot{T}, \dot{c}, \dot{\lambda})$ を求めます。方向ベクトルの計算は連立方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Phi}{\partial T} & \frac{\partial \Phi}{\partial c} & \frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \Psi}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial \Psi}{\partial T} & \frac{\partial \Psi}{\partial c} & \frac{\partial \Psi}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} & \frac{\partial P_1}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} & \frac{\partial P_2}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial K}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial K}{\partial \mathbf{v}} & \frac{\partial K}{\partial T} & \frac{\partial K}{\partial c} & \frac{\partial K}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}}_{new} \\ \dot{\mathbf{v}}_{new} \\ \dot{T}_{new} \\ \dot{c}_{new} \\ \dot{\lambda}_{new} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

を解いて ${}^t(\dot{\mathbf{u}}_{new}, \dot{\mathbf{v}}_{new}, \dot{T}_{new}, \dot{c}_{new}, \dot{\lambda}_{new})$ を 1 に正規化して求めます。以上の手続きから、パラメータを変化させながら (4.38), (4.39) の脈動進行パルス波を数値的に求めることができます。

4.4.1 脈動進行パルス波の安定性 [27]

この節では (4.40), (4.41) に対する脈動進行パルス波の数値的な安定性について説明します。いま、 $\mathbf{w} \equiv {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T, c, \lambda)$ は (4.47) の解とします。このとき、脈動進行パルス波の安定性は、脈動定常パルス波の安定性と同様に (4.49) の右辺第 1 項の $2N \times 2N$ の Monodromy Matrix

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \\ \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{w}) & \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{w}) \end{pmatrix}$$

の固有値を調べることで決まります。すなわち、固有値 σ を

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \vdots \\ \sigma_{2N} \end{pmatrix} \in \mathbf{C}^{2N}$$

とおいたとき

$$\begin{aligned} |\sigma_i| < 1 \quad \text{for } 1 \leq \forall i \leq 2N &\Rightarrow \text{脈動進行パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は安定解,} \\ |\sigma_i| > 1 \quad \text{for } 1 \leq \exists i \leq 2N &\Rightarrow \text{脈動進行パルス波 } {}^t(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \text{ は不安定解} \end{aligned}$$

となります。Monodromy Matrix は必ず

$$\text{Re } \sigma_i = 1, \quad \text{Im } \sigma_i = 0, \quad 1 \leq \exists i \leq 2N$$

となる固有値を 1 つ持ちますが、この固有値は安定性に影響を与えないことがわかっています。

第5章 スペクトル法を用いた数値計算

第3章では、反応拡散系の進行波解 (定常解), 脈動進行波解 (脈動定常解) の数値計算法として差分法を用いた数値計算法を解説しました. しかし, 差分法による空間離散化では解構造を精度良く計算できない場合があることがわかっています. そのため, この章では空間微分の離散化を高精度計算するためにスペクトル法 [29, 30] を用いた解構造数値計算手法について説明します. 次の空間1次元 M 変数反応拡散系

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + \mathbf{F}(U; \lambda), & t > 0, \quad x \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_x(t, -L) = U_x(t, L), & t > 0, \\ U(0, x) = U_0(x), & x \in [-L, L] \end{cases} \quad (5.1)$$

に現れる進行波解 (定常解) と脈動進行波解 (脈動定常解) の解構造を数値的に求める計算法について説明します. 周期境界条件を考慮して, スペクトル法を用いるために, 区間を $[-\pi, \pi]$ で計算します. そのために, (5.1) に対して $\tilde{x} = \pi x/L$, $\tilde{D} = \text{diag}(\tilde{D}_1, \dots, \tilde{D}_M) = \text{diag}(4D_1\pi^2/L^2, \dots, 4D_M\pi^2/L^2) \in \mathbb{R}^M$ と変数変換を行い, $\tilde{x}$, $\tilde{D}$ をふたたび x , D で書き換えた次の反応拡散系を用います:

$$\begin{cases} U_t = DU_{xx} + \mathbf{F}(U), & t > 0, \quad x \in [-\pi, \pi], \\ U(t, -\pi) = U(t, \pi), \quad U_x(t, -\pi) = U_x(t, \pi), & t > 0, \\ U(0, x) = U_0(x), & x \in [-\pi, \pi]. \end{cases}$$

この反応拡散系に対して, 定常パルス解, 進行パルス解, 脈動パルス解, 脈動進行パルス解を数値的に求めることを考えます. これらの解に対して saddle-node 分岐点を含めた解構造を求めるために, phase conditon(3.21) と pseudo-arclength continuation 法 (3.23) を用います. 3.1 節で解説したように, 定常解と進行波解は次の非線形方程式の解 (U_0, c, λ) を求めることで得ることができます:

$$\begin{cases} \mathbf{H}_s(\mathbf{U}_0, c, \lambda) := D\mathbf{U}_{0zz} + c\mathbf{U}_{0z} + \mathbf{F}(\mathbf{U}_0; \lambda) = \mathbf{0}, & z \in [-\pi, \pi], \\ P_s(\mathbf{U}_0, c, \lambda) := \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{U}_0(z) \cdot \overline{\mathbf{U}}_{0z}(z) dz = 0, \\ K_s(\mathbf{U}_0, c, \lambda, s) := \theta_U \int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{U}_0 - \overline{\mathbf{U}}_0) \cdot \dot{\mathbf{U}} dz + \theta_c(c - \bar{c})\dot{c} + \theta_\lambda(\lambda - \bar{\lambda})\dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0, \\ U_0(-\pi) = U_0(\pi), \quad U_{0z}(-\pi) = U_{0z}(\pi). \end{cases} \quad (5.2)$$

ただし, $c = 0$ のときは定常解, $c \neq 0$ のときは進行波解となります. 一方, 3.2 節で解説したように, 脈動定常解と脈動進行波解は次の非線形方程式の解 (U_0, T, c, λ) を求めることから得るこ

とができます：

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}_p(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) := \boldsymbol{\Phi}(1, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) - \mathbf{U}_0(z) = \mathbf{0}, \quad z \in [-\pi, \pi], \\ P_{p_1}(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) := \int_0^1 \int_{-\pi}^{\pi} \left(D\bar{\mathbf{U}}_{zz}(t, z) + c\bar{\mathbf{U}}_z(t, z) \right. \\ \quad \left. + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(t, z); \bar{\lambda}) \right) \cdot \boldsymbol{\Phi}(t, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) dz dt = 0, \\ P_{p_2}(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda) := \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{U}_0(z) \cdot \bar{\mathbf{U}}_{0z}(z) dz = 0, \\ K_p(\mathbf{U}_0, T, c, \lambda, s) := \theta_U \int_{-\pi}^{\pi} (\mathbf{U}_0 - \bar{\mathbf{U}}_0) \cdot \dot{\mathbf{U}} dz + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} \\ \quad + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{array} \right. \quad (5.3)$$

ただし、 $c = 0$ のときは脈動定常解、 $c \neq 0$ のときは脈動進行波解となります。また、 $\boldsymbol{\Phi}(1, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda)$ は次の時間発展方程式の解です：

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{U}_t = T \left(D\mathbf{U}_{zz} + c\mathbf{U}_z + \mathbf{F}(\mathbf{U}; \lambda) \right), \quad t > 0, \quad z \in [-\pi, \pi], \\ \mathbf{U}(t, -\pi) = \mathbf{U}(t, \pi), \quad \mathbf{U}_z(t, -\pi) = \mathbf{U}_z(t, \pi), \quad t > 0, \\ \mathbf{U}(0, z) = \mathbf{U}_0(z), \quad z \in [-\pi, \pi]. \end{array} \right. \quad (5.4)$$

5.1 定常解の数値計算法 –Fourier Collocation 法–

ここでは (5.2) の解を数値的に求めるために、Fourier 級数によるスペクトル法を用います。 (5.2) の近似解 $(\mathbf{U}_0(z), c, \lambda)$ として、 $\mathbf{U}_0(z)$ は周期境界条件を考慮して J 次の有限 Fourier 級数で展開されるものとします：

$$\mathbf{U}_0(z) = \sum_{k=-J/2}^{J/2-1} \widehat{\mathbf{U}}_{0,k} e^{ikz}. \quad (5.5)$$

ただし、 $\widehat{\mathbf{U}}_{0,k} = (\widehat{U}_{0,k,1}, \dots, \widehat{U}_{0,k,M}(z)) \in \mathbb{C}^M$ 、 i は虚数単位です。区間 $[-\pi, \pi]$ から J 個の点 $z_j := -\pi + j\Delta z$ ($0 \leq j \leq J-1, \Delta z = 2\pi/J$) を選び、 $\mathbf{H}_s = \mathbf{0}$ に対して Fourier Collocation 法、 P_s と K_s に対して台形公式を用いると次のように表されます：

$$\left\{ \begin{array}{l} D\mathbf{U}_{0zz}(z_j) + c\mathbf{U}_{0z}(z_j) + \mathbf{F}(\mathbf{U}_0(z_j); \lambda) = \mathbf{0}, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{U}_0(z_j) \cdot \bar{\mathbf{U}}_0(z_j) = 0, \\ \theta_U \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{U}_0(z_j) - \bar{\mathbf{U}}_0(z_j)) \cdot \dot{\mathbf{U}}(z_j) \Delta z + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{array} \right. \quad (5.6)$$

ただし、(5.6) の離散点 $\mathbf{U}_0(z_j)$, $\mathbf{U}_{0z}(z_j)$, $\mathbf{U}_{0zz}(z_j)$, $\bar{\mathbf{U}}_0(z_j)$, $\bar{\mathbf{U}}_{0z}(z_j)$ はこれ以降の計算で与えます。(5.5) の両辺に $e^{-ilz}/(2\pi)$ ($-N/2 \leq l \leq N/2-1$) を掛け、区間 $[-\pi, \pi]$ で積分を行うと次のように表されます：

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{U}}_{0,l} &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{U}_0(z) e^{-ilz} dz \\ &\approx \frac{1}{J} \sum_{j'=0}^{J-1} \mathbf{u}_{j'} e^{-ilz_{j'}}, \quad -J/2 \leq l \leq J/2-1. \end{aligned} \quad (5.7)$$

ただし, $\mathbf{u}_j$ は区間 z を間隔 $\Delta z = 2\pi/J$ で分割した各点 z_j に対する $U_0(z)$ の離散点, すなわち,

$$\mathbf{u}_j = (u_{1,j}, \dots, u_{M,j}) := \mathbf{U}_0(z_j) = (U_{0,1}(z_j), \dots, U_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M$$

です. また, 積分は台形公式で近似します. 次に, (5.7) を (5.5) に代入すると

$$U_0(z) = \sum_{j'=0}^{J-1} \underbrace{\left(\frac{1}{J} \sum_{k=-J/2}^{J/2-1} e^{ik(z-z_{j'})} \right)}_{R(z; z_{j'})} \mathbf{u}_{j'} \quad (5.8)$$

を得ます. ここで, $R(z; z_{j'}) := \frac{1}{J} \sum_{k=-J/2}^{J/2-1} e^{ik(z-z_{j'})}$ と定義すると

$$R(z_j; z_{j'}) = \begin{cases} 0, & j \neq j', \\ 1, & j = j' \end{cases} \quad (5.9)$$

となります. $U_z(z)$, $U_{zz}(z)$ は (5.5) を z に関して微分することで得られます:

$$\begin{aligned} U_z(z) &= \sum_{j'=0}^{J-1} R_z(z; z_{j'}) \mathbf{u}_{j'}, \\ U_{zz}(z) &= \sum_{j'=0}^{J-1} R_{zz}(z; z_{j'}) \mathbf{u}_{j'}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

ただし, $R_z(z_j; z_{j'})$ と $R_{zz}(z_j; z_{j'})$ は

$$\begin{aligned} R_z(z_j; z_{j'}) &= \begin{cases} \frac{(-1)^{j-j'}}{2} \cot\left(\frac{\pi(j-j')}{J}\right), & j \neq j', \\ 0, & j = j', \end{cases} \\ R_{zz}(z_j; z_{j'}) &= \begin{cases} \frac{(-1)^{j-j'}}{\cos\left(\frac{2\pi(j-j')}{J}\right) - 1}, & j \neq j', \\ -\frac{J^2 + 2}{12}, & j = j' \end{cases} \end{aligned} \quad (5.11)$$

です. 以上より, 離散点 $U_0(z_j)$, $U_{0z}(z_j)$, $U_{0zz}(z_j)$ が与えられます. $\bar{U}_0(z_j)$, $\bar{U}_{0z}(z_j)$ は $U_0(z_j)$, $U_{0z}(z_j)$ と同じ計算で与えられるため省略します. 従って, (5.6) に対して (5.8)–(5.11) を用いると次の $(MJ+2)$ 元連立非線形方程式が得られます:

$$\begin{cases} \widetilde{\mathbf{H}}_s(\widetilde{\mathbf{u}}_0, c, \lambda) := D \sum_{j'=0}^{J-1} R_{zz}(z_j; z_{j'}) \mathbf{u}_{j'} + c \sum_{j'=0}^{J-1} R_z(z_j; z_{j'}) \mathbf{u}_{j'} + \mathbf{f}_j = \mathbf{0}, & 0 \leq j \leq J-1, \\ \widetilde{P}_s(\widetilde{\mathbf{u}}_0, c, \lambda) := \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{u}_j \cdot \left(\sum_{j'=0}^{J-1} R_z(z_j; z_{j'}) \bar{\mathbf{u}}_{j'} \right) = 0, \\ \widetilde{K}_s(\widetilde{\mathbf{u}}_0, c, \lambda, s) := \theta_U \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{u}_j - \bar{\mathbf{u}}_j) \cdot \dot{\mathbf{u}}_j \Delta z + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{cases} \quad (5.12)$$

ただし

$$\begin{aligned}
\mathbf{f}_j &= (f_{1,j}, \dots, f_{M,j}) := \mathbf{F}(\mathbf{U}_0(z_j)) = (F_1(\mathbf{U}_0(z_j)), \dots, F_M(\mathbf{U}_0(z_j))) \in \mathbb{R}^M, \\
\bar{\mathbf{u}}_j &= (\bar{u}_{1,j}, \dots, \bar{u}_{M,j}) := \bar{\mathbf{U}}_0(z_j) = (\bar{U}_{0,1}(z_j), \dots, \bar{U}_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\
\dot{\mathbf{u}}_j &= (\dot{u}_{1,j}, \dots, \dot{u}_{M,j}) := \dot{\mathbf{U}}(z_j) = (\dot{U}_1(z_j), \dots, \dot{U}_M(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\
\tilde{u}_{(m-1)J+j+1} &:= u_{m,j}, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\
\tilde{\mathbf{u}} &:= (\tilde{u}_1, \dots, \tilde{u}_{MJ}) \in \mathbb{R}^{MJ}
\end{aligned}$$

です。(5.12)の数値解法にはNewton法を適用します。(5.12)に対してNewton法を用いると、(3.8)のように連立1次方程式を解くことになります。スペクトル法の場合は(3.8)に対応するヤコビ行列が密行列となるため、連立1次方程式の解法は部分ピボット選択付きのLU分解法を用います。そのため、連立1次方程式を解く部分は差分法に比べ計算時間を必要とします。しかしながら、次の数値結果で示すようにスペクトル法を用いた場合、空間微分項を精度良く計算できます。

数値結果

反応拡散系の定常解と進行波解を求める数値計算法として差分法とスペクトル法を与えましたが、ここでは2つの方法の計算精度を比較したいと思います。次の2変数反応拡散系

$$\begin{cases} \varepsilon \tau U_{1t} = 4\pi^2 \varepsilon^2 / L^2 U_{1xx} + U_1(1 - U_1)(U_1 - a) - U_2, \\ U_{2t} = 4\pi^2 / L^2 U_{2xx} + U_1 - \gamma U_2 \end{cases} \quad t > 0, \quad x \in [-\pi, \pi), \quad (5.13)$$

に対して空間近似として、スペクトル近似と差分近似を行い、それぞれの近似解法で定常パルス波と進行パルス波の分岐図を求め、定常パルス波から予測される pitch-fork 分岐点の位置 P_{SP} と進行パルス波から予測される pitch-fork 分岐点の位置 P_{TP} を求めます。理論上では定常パルス波の pitch-fork 分岐点から進行パルス波が現れるため P_{SP} と P_{TP} は一致しますが、数値計算では空間微分の離散化誤差により P_{SP} と P_{TP} の位置が必ずしも一致しないことがあります。スペクトル近似による分岐計算は差分近似より精度良く計算できることを確かめるために、次の数値実験を行いました。

(5.13)のパラメータは $\varepsilon = 0.04$, $a = 0.25$, $\gamma = 10.176$, $L = 30.0$ と固定して、 τ をコントロールパラメータとして与えます。空間分割幅は $\Delta z = \Delta x = 2\pi/1024$ とします。このとき、 P_{SP} の位置の求め方として、 τ を変化させながら定常パルス波を求め、その解に対する実固有値が虚軸を横切った τ の値を pitch-fork 分岐点と判断します。一方、 P_{TP} の位置の求め方として、パラメータ τ を変化させながら進行パルス波の速度を求め、その速度の符号が変化した τ の値を pitch-fork 分岐点と判断します。(5.13)の定常解と進行波解の離散化に対して、スペクトル法は本節で解説した(5.12)を用いて、差分法は次の2通りの方法で離散化する。1つは拡散項と移流項に対して共に中心差分近似を用いる方法：

$$\begin{cases} D \frac{\mathbf{u}_{j-1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j+1}}{\Delta z^2} + c \frac{\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{u}_{j-1}}{2\Delta z} + \mathbf{f}_j = \mathbf{0}, & 0 \leq j \leq J-1, \\ \mathbf{u}_{-1} = \mathbf{u}_{J-1}, \quad \mathbf{u}_J = \mathbf{u}_0. \end{cases} \quad (5.14)$$

もう一つは拡散項に対して中心差分，移流項に対して3次精度風上差分を用いる方法：

$$\left\{ \begin{array}{l} D \frac{\mathbf{u}_{j+1} - 2\mathbf{u}_j + \mathbf{u}_{j-1}}{\Delta z^2} \\ + c \frac{-\mathbf{u}_{j+2} + 8\mathbf{u}_{j+1} - 8\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{u}_{j-2}}{12\Delta z} + |c| \frac{\mathbf{u}_{j+2} - 4\mathbf{u}_{j+1} + 6\mathbf{u}_j - 4\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{u}_{j-2}}{12\Delta z} \\ + \mathbf{f}_j = \mathbf{0}, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \mathbf{u}_{-2} = \mathbf{u}_{J-2}, \quad \mathbf{u}_{-1} = \mathbf{u}_{J-1}, \quad \mathbf{u}_J = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{u}_{J+1} = \mathbf{u}_1. \end{array} \right. \quad (5.15)$$

(5.14) と (5.15) は移流項に対する離散近似の与え方のみが違うため，(5.14) と (5.15) の定常パルス波の固有値の値は一致します．これらの離散近似を用いたとき， P_{SP} と P_{TP} の位置の結果を図 5.1 に示す．スペクトル近似と差分近似の P_{SP} の位置はそれぞれ $\tau = 0.050392$ ， $\tau = 0.050075$ に対して， P_{TP} の位置は (5.12) のとき $\tau = 0.050392$ ，(5.14) のとき $\tau = 0.050492$ ，(5.15) のとき $\tau = 0.050091$ となります．これらの結果からスペクトル法による離散化が一番理論に適した結果であることが分かります．

5.2 周期解の数値計算法 –Fourier-Galerkin 法–

ここでは (5.3)，(5.4) の解を数値的に求めるために Fourier 級数展開によるスペクトル法を適用します．最初に，Fourier-Galerkin 法を用いて (5.4) の時間発展解を数値的に求めます．(5.4) の近似解 $\mathbf{U}(t, z)$ は周期境界条件を考慮して， K 次の有限 Fourier 級数で展開されるものとします：

$$\mathbf{U}(t, z) = \sum_{k=-K/2}^{K/2-1} \widehat{\mathbf{U}}_k(t) e^{ikz}, \quad -K/2 \leq k \leq K/2 - 1. \quad (5.16)$$

ただし， $\widehat{\mathbf{U}}_k = (\widehat{U}_{k,1}, \dots, \widehat{U}_{k,M}(z)) \in \mathbb{C}^M$ ， i は虚数単位です．このとき，展開係数の自由度は複素数の実部と虚部を含めて $2K$ 個であるが， $\mathbf{U} = \mathbf{U}^*$ ($*$ は複素共役) であるため $\widehat{\mathbf{U}}_{-k}^* = \widehat{\mathbf{U}}_k$ が得られ，展開係数の自由度は $(K+1)$ 個となります．(5.16) を (5.4) の第1式と第3式に代入して両辺に $e^{-ilz}/(2\pi)$ ($-K/2 \leq l \leq K/2 - 1$) を掛け，区間 $[-\pi, \pi]$ で積分を行うと

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\widehat{\mathbf{U}}_l}{dt} = T(-l^2 D + iclI) \widehat{\mathbf{U}}_l + T \widehat{\mathbf{F}}_l(\mathbf{U}), \quad -K/2 \leq l \leq K/2 - 1, \\ \widehat{\mathbf{U}}_l(0) = \widehat{\mathbf{U}}_{0,l} \end{array} \right. \quad (5.17)$$

を得ます．ただし， I は単位行列， $\widehat{\mathbf{U}}_{0,l} \in \mathbb{C}^M$ ， $\widehat{\mathbf{F}}_l(\mathbf{U}) \in \mathbb{C}^M$ はそれぞれ $\mathbf{U}_0(z)$ ， $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ の第 l 次の Fourier 係数です：

$$\begin{aligned} \widehat{\mathbf{U}}_{0,l} &:= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{U}_0(z) e^{-ilz} dz \approx \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{U}_0(z_j) e^{-ilz_j}, \\ \widehat{\mathbf{F}}_l(\mathbf{U}) &:= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \mathbf{F}(\mathbf{U}(t, z)) e^{-ilz} dz \approx \frac{1}{J} \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{F}(\mathbf{U}(t, z_j)) e^{-ilz_j}. \end{aligned} \quad (5.18)$$

ただし，(5.18) の積分は区間 $[-\pi, \pi]$ を J 等分した各点 $z_j = -\pi + j\Delta z$ ($0 \leq j \leq J-1$, $\Delta z = 2\pi/J$) を用いて台形公式で近似します．この数値積分による J 個の離散データから Fourier 係数を求めることを逆離散 Fourier 変換と呼び，この計算には高速 Fourier 変換を用います．このとき， $\mathbf{F}(\mathbf{U})$

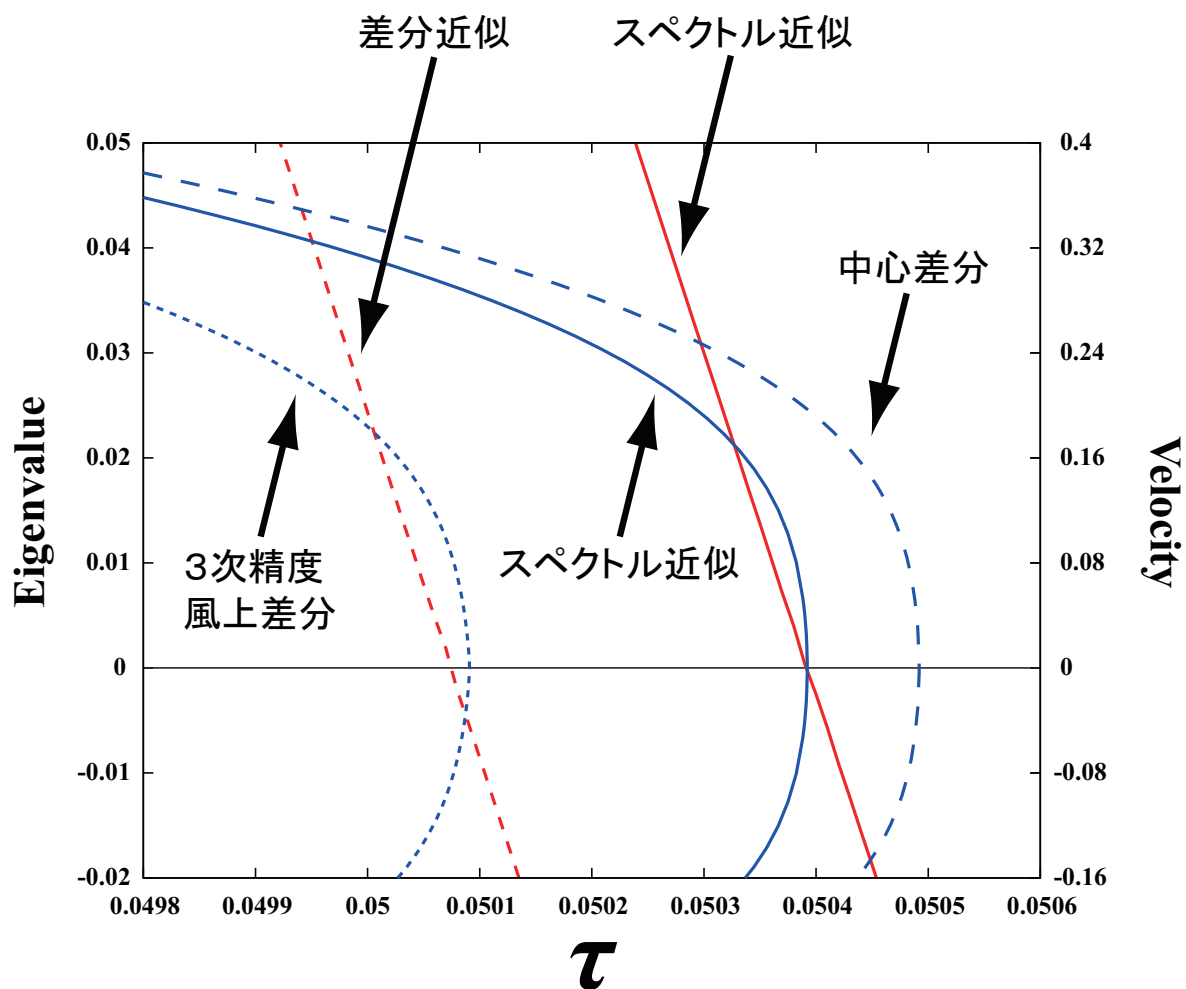


図 5.1: 赤色と青色はそれぞれパラメータ τ を変化させたときの定常パルス波が持つ実固有値の変化と進行パルス波の速度変化です。赤色と青色の実線はスペクトル近似，破線と点線は差分近似です。差分近似は 2 通りの方法で離散化を行い，移流項の離散化に中心差分 (5.14)，3 次精度風上差分 (5.15) を用いた場合の結果をそれぞれ青色の破線と点線で示します。

が非線形項である場合、離散化によって aliasing 誤差が発生するため¹、非線形項の最大次数が $p(\geq 2)$ 次の関数のとき $(p+1)K/2 \leq J$ として計算します。ただし、aliasing 誤差を除去するとき、高次の分点数 J が必要になる場合や $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ が指数関数などの非線形項を含む場合は aliasing 誤差を残したまま処理します²。すなわち、 $K = J$ とする。

常微分方程式 (5.17) の解法には 4 次の Runge-Kutta 法を用います。このとき、常微分方程式の右辺に対して陰的公式を用いると時間ステップごとに非線形連立方程式を解かなければならず計算時間がかかるため、陽的公式を用います。しかし、陽的公式を用いると (5.17) の線形項を安定に計算する必要があるため、時間分割幅を小さくしないと正しい解が得られない問題が起こります。そのため、次のような常微分方程式 (5.17) の式変形を行います³。 $\text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_M) := T(-l^2 D + iclI)$ と定義して、(5.17) の第 1 式の両辺に $\mathbf{\Lambda}(t) := \text{diag}(e^{\sigma_1 t}, \dots, e^{\sigma_M t}) \in \mathbb{C}^M$ をかけると次の式が得られます：

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{\Lambda}^{-1}(t) \widehat{\mathbf{U}}_l(t)) = T \mathbf{\Lambda}^{-1}(t) \widehat{\mathbf{F}}_l(\mathbf{U}). \quad (5.19)$$

数値計算では (5.19) に対して 4 次の Runge-Kutta 法を用います：

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_1 &= \Delta t T \widehat{\mathbf{F}}_l(\mathbf{U}), \\ \mathbf{h}_2 &= \Delta t T \widehat{\mathbf{F}}_l \left(\mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \left(\mathbf{U} + \frac{1}{2} \mathbf{h}_1 \right) \right), \\ \mathbf{h}_3 &= \Delta t T \widehat{\mathbf{F}}_l \left(\mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{U} + \frac{1}{2} \mathbf{h}_2 \right), \\ \mathbf{h}_4 &= \Delta t T \widehat{\mathbf{F}}_l \left(\mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \left(\mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \mathbf{U} + \frac{1}{2} \mathbf{h}_3 \right) \right), \\ \widehat{\mathbf{U}}_l(t + \Delta t) &= \mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \left(\mathbf{\Lambda} \left(\frac{\Delta t}{2} \right) \left(\widehat{\mathbf{U}}_l(t) + \frac{1}{6} \mathbf{h}_1 \right) + \frac{1}{3} (\mathbf{h}_2 + \mathbf{h}_3) \right) + \frac{1}{6} \mathbf{h}_4. \end{aligned}$$

ただし、 $\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \mathbf{h}_3, \mathbf{h}_4 \in \mathbb{C}^M$ です。

常微分方程式 (5.17) の計算から時間 $(t + \Delta t)$ での Fourier 係数を求めたら、(5.16) により $\mathbf{U}(t + \Delta t, z_j)$ を求めます。このとき、Fourier 係数から離散データを求めることを離散 Fourier 変換と呼び、この計算には高速 Fourier 変換を用います。以上より

$$\begin{array}{ccccccc} \cdots \rightarrow \mathbf{U}(t, z) \rightarrow \mathbf{F}(\mathbf{U}) & \rightarrow & (\widehat{\mathbf{U}}(t), \widehat{\mathbf{F}}(\mathbf{U})) & \rightarrow & (\widehat{\mathbf{U}}(t + \Delta t)) & \rightarrow & \mathbf{U}(t + \Delta t, z) \rightarrow \cdots \\ & \nearrow & & \uparrow & & \nwarrow & \\ & \text{逆離散 Fourier 変換} & & (5.17) & & \text{離散 Fourier 変換} & \end{array}$$

を繰り返して時間発展解を求め、(5.3) の第 1 式を数値的に求めます。

(5.3) の P_{p_1}, P_{p_2}, K_p に対する積分は台形公式で近似を行い、空間の離散化に対しては (5.8)–(5.11)

¹詳しい説明は [29, 30] を参照してください。

²aliasing 誤差による誤差項は高波数成分の積み重ねで生じるので、 K を大きくとって高波数成分が十分小さくなる場合は aliasing 誤差の誤差項を無視できると期待できるため、aliasing 誤差を除去しない方法でもあまり問題とならない。

³詳しい説明は [30] を参照してください。

を用います。このとき、(5.3) の離散化から $(MJ + 3)$ 元連立非線形方程式が得られます：

$$\left\{ \begin{array}{l} \widetilde{\mathbf{H}}_p(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) := \widetilde{\boldsymbol{\varphi}}(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) - \widetilde{\mathbf{u}}_0 = \mathbf{0}, \\ \widetilde{P}_{p_1}(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) := \sum_{n=0}^N \sum_{j=0}^{J-1} \left(D \sum_{j'=0}^{J-1} R_{zz}(z_j; z_{j'}) \overline{\mathbf{u}}_{j'}^n + \bar{c} \sum_{j'=0}^{J-1} R_z(z_j; z_{j'}) \overline{\mathbf{u}}_{j'}^n + \overline{\mathbf{f}}_j^n \right) \cdot \boldsymbol{\varphi}_j^n = 0, \\ \widetilde{P}_{p_2}(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) := \sum_{j=0}^{J-1} \mathbf{u}_j^0 \cdot \left(\sum_{j'=0}^{J-1} R_z(z_j; z_{j'}) \overline{\mathbf{u}}_{j'}^0 \right) = 0, \\ \widetilde{K}_p(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda, s) := \theta_u \sum_{j=0}^{J-1} (\mathbf{u}_j^0 - \overline{\mathbf{u}}_j^0) \cdot \dot{\mathbf{u}}_j \Delta z + \theta_T (T - \bar{T}) \dot{T} \\ \quad + \theta_c (c - \bar{c}) \dot{c} + \theta_\lambda (\lambda - \bar{\lambda}) \dot{\lambda} - (s - \bar{s}) = 0. \end{array} \right. \quad (5.20)$$

ただし、(5.20) の変数は次のように与えます：

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{u}}_{0,j} &= (\dot{u}_{0,1,j}, \dots, \dot{u}_{0,M,j}) := \mathbf{U}_0(z_j) = (U_{0,1}(z_j), \dots, U_{0,M}(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \widetilde{u}_{0,(m-1)J+j+1} &:= \dot{u}_{0,m,j}, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \widetilde{\mathbf{u}}_0 &:= (\widetilde{u}_{0,1}, \dots, \widetilde{u}_{0,MJ}) \in \mathbb{R}^{MJ}, \\ \mathbf{u}_j^0 &:= \dot{\mathbf{u}}_{0,j}, \\ \boldsymbol{\varphi}_j^n(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda) &= (\varphi_{1,j}^n(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda), \dots, \varphi_{M,j}^n(\widetilde{\mathbf{u}}_0, T, c, \lambda)) \\ &:= \boldsymbol{\Phi}(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) = (\Phi_1(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda), \dots, \Phi_M(t_n, z_j; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda)), \\ \widetilde{\boldsymbol{\varphi}}_{(m-1)J+j+1}^N &:= \varphi_{m,j}^N, \quad 1 \leq m \leq M, \quad 0 \leq j \leq J-1, \\ \widetilde{\boldsymbol{\varphi}} &:= (\widetilde{\boldsymbol{\varphi}}_1^N, \dots, \widetilde{\boldsymbol{\varphi}}_{MJ}^N) \in \mathbb{R}^{MJ}, \\ \overline{\mathbf{u}}_j^n &= (\overline{u}_{1,j}^n, \dots, \overline{u}_{M,j}^n) := \overline{\mathbf{U}}(t_n, z_j) = (\overline{U}_1(t_n, z_j), \dots, \overline{U}_M(t_n, z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \dot{\mathbf{u}}_j &= (\dot{u}_{1,j}, \dots, \dot{u}_{M,j}) := \dot{\mathbf{U}}(z_j) = (\dot{U}_1(z_j), \dots, \dot{U}_M(z_j)) \in \mathbb{R}^M, \\ \overline{\mathbf{f}}_j^n &= (\overline{f}_{1,j}^n, \dots, \overline{f}_{M,j}^n) := \mathbf{F}(\overline{\mathbf{u}}_j^n) = (F_1(\overline{\mathbf{u}}_j^n), \dots, F_M(\overline{\mathbf{u}}_j^n)) \in \mathbb{R}^M. \end{aligned}$$

(5.20) の $\widetilde{P}_{p_1}$ は差分法の離散化 (3.27) の $\widetilde{P}_1$ に比べ計算コストがかさんでしまうため、 $\widetilde{P}_{p_1}$ の計算に時間がかかる場合は P_{p_1} の離散化に差分近似を与えたり、phase condition を変えて計算します。例えば、変更する phase condition として P_{p_1} の空間積分を全区間に対して与えるかわりに、パルス波が局在化した範囲 $[\alpha, \beta]$ ($\alpha, \beta \in [-\pi, \pi]$) で与える方法

$$\int_0^1 \int_\alpha^\beta \left(D \overline{\mathbf{U}}_{zz}(t, z) + \bar{c} \overline{\mathbf{U}}_z(t, z) + \mathbf{F}(\overline{\mathbf{U}}(t, z), \bar{\lambda}) \right) \cdot \boldsymbol{\Phi}(t, z; \mathbf{U}_0, T, c, \lambda) dz dt = 0.$$

があります。(5.20) の数値解法には Newton 法を適用します。これ以降の解説は 3.2 節と同じであるため省略します。

数値結果

反応拡散系の脈動進行波解を求める数値計算法として、スペクトル法による空間離散化の計算精度が差分法に比べ、高くなっているか調べるために、次の数値実験を行いました。反応拡散系の方程式として (5.13) を用います。パラメータは $\varepsilon = 0.04$, $a = 0.25$, $\gamma = 10.176$, $L = 30.0$ と固定して、 τ をコントロールパラメータとして与えます。時間分割幅と空間分割幅はそれぞれ $\Delta t = 0.0001$, $\Delta z = \Delta x = 2\pi/1024$ とします。最初に、 $T = 2.6$ の安定な脈動進行パルス波を本

節で解説したスペクトル近似 (5.20) と 3.2 節で解説した差分近似 (3.27) を用いて Newton 法により数値的に求めます。この数値的に求めた脈動進行パルス波をスペクトル近似の場合は TB_{S1} 、差分近似の場合は TB_{D1} と表記します。ただし、差分近似の場合は (5.4) の時間発展方程式の離散化に対して拡散項に中心差分、移流項に 3 次精度風上差分を与えます：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{u}_j(t)}{dt} = T \left(D \frac{\mathbf{u}_{j+1}(t) - 2\mathbf{u}_j(t) + \mathbf{u}_{j-1}(t)}{\Delta z^2} \right. \\ \quad + c \frac{-\mathbf{u}_{j+2}(t) + 8\mathbf{u}_{j+1}(t) - 8\mathbf{u}_{j-1}(t) + \mathbf{u}_{j-2}(t)}{12\Delta z} \\ \quad \left. + |c| \frac{\mathbf{u}_{j+2}(t) - 4\mathbf{u}_{j+1}(t) + 6\mathbf{u}_j(t) - 4\mathbf{u}_{j-1}(t) + \mathbf{u}_{j-2}(t)}{12\Delta z} + \mathbf{f}_j(\mathbf{u}_j(t)) \right) = \mathbf{0}, \\ \mathbf{u}_{-2}(t) = \mathbf{u}_{J-2}(t), \quad \mathbf{u}_{-1}(t) = \mathbf{u}_{J-1}(t), \quad \mathbf{u}_J(t) = \mathbf{u}_0(t), \quad \mathbf{u}_{J+1}(t) = \mathbf{u}_1(t). \end{array} \right. \quad (5.21)$$

ただし、 $0 \leq j \leq J-1$ 、 $\mathbf{u}_j$ は t の関数です。(5.21) の右辺は陽的公式を用います。常微分方程式 (5.21) の解法には 4 次の Runge-Kutta 法を用います。次に、Newton 法で求めた $TB_{S1}(TB_{D1})$ を初期値にとり、(5.4) の方程式に対して $c = 0$ としたときの時間発展解を計算します。この時間発展方程式の解を $TB_{S2}(TB_{D2})$ と表記します。 $TB_{S1}(TB_{D1})$ は安定な脈動進行パルス波であるため、 $TB_{S2}(TB_{D2})$ は同じ振動数をもつ脈動進行パルス波が求まるはずですが、しかしながら、図 5.2 で示すように差分近似では移流項の空間微分による計算精度の問題によって、別の振動数をもつ脈動進行パルス波へ遷移します。従って、差分近似はスペクトル近似に比べ、移流項による空間微分が精度よく計算できないことが分かります。

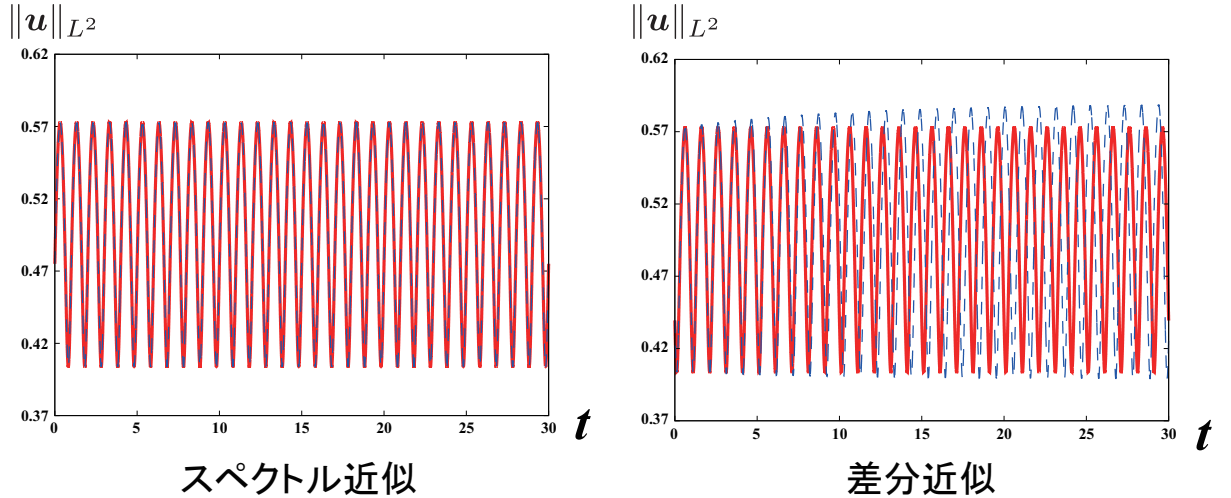


図 5.2: TB_{S1} , TB_{S2} , TB_{D1} , TB_{D2} の時間プロット。左図はスペクトル近似で赤色 (青色) は $TB_{S1}(TB_{S2})$ 、右図は差分近似で赤色 (青色) は $TB_{D1}(TB_{D2})$ です。時系列の縦軸は $\|\mathbf{u}\|_{L^2} := \sqrt{\int_{-\pi}^{\pi} u^2(t, z) + v^2(t, z) dz}$ です。

付 録 A 位相条件 (Phase Condition)

2.2 節で定義したパルス波は空間並進性の自由度を持っています。すなわち、 $\bar{U}(x) \in \mathbb{R}^M$ が定義 2.5 の定常パルス波ならば、任意の $\sigma \in \mathbb{R}$ に対して平行移動した $\bar{U}(x + \sigma) \in \mathbb{R}^M$ も定義 2.5 の解となります。同様に、進行パルス波、脈動解 (脈動定常パルス波と脈動進行パルス波) にも同じことが言えます。さらに、脈動解は時間並進性の自由度も持っています。空間 (時間) に対する並進性の自由度があることはパルス波が無限個存在することになり、解に一意性が無いことを意味します。そこで、位相条件 [1] から並進性の自由度を取り除き、解の一意を与えます。ここでは空間方向と時間方向の位相条件の導入方法の解説を行います。A.1 節では進行パルス波 (定常パルス波) に対する空間方向の位相条件、A.2 節では脈動解に対する時間方向の位相条件を与えます。

A.1 空間方向の phase condition

本節では、進行パルス波 (定常パルス波) の空間並進性の自由度を取り除くために、空間方向の phase condition を導出します。

A.1.1 位相条件 1

進行パルス波が図 A.1.1(a) のように空間方向に無限個存在すると仮定します。このとき、phase condition として、空間上のある位置 $z = \tilde{z} \in [-L, L]$ でパルス波が $\tilde{U} \in \mathbb{R}$ の値を持つように与えます：

$$U(\tilde{z}) = \tilde{U}. \quad (\text{A.1})$$

例えば、 $\tilde{z} = 0.0$, $\tilde{U} = 0.5$ と与えると、無限個存在するパルス波は 2 つに選択されます (図 A.1.1(b)). この条件は解を一意に定めていませんが、2 つの解に選択したことからパルス波を Newton 法で求めるとき、初期値の選び方次第で解の収束が期待できます。しかし、この方法は解の形状によって $\tilde{z}$, $\tilde{U}$ の与え方が変わるため汎用性のある方法とはいえません。

A.1.2 位相条件 2

ここでは位相条件 (A.1) より汎用性のある位相条件を導出します。この位相条件は進行パルス波のような孤立波や周期境界条件下における解に対する位相条件として有効な方法です。

パラメータ $\lambda = \lambda_1$ の進行パルス波を $(\bar{U}(z), \bar{c}) \in \mathbb{R}^{M+1}$ と表し、既知の解とします。このとき、 $\lambda = \lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$ の進行パルス波 $(\check{U}(z), \check{c}) \in \mathbb{R}^{M+1}$ を求めたいとします。空間シフトの自由度により、任意の $\sigma_1 \in \mathbb{R}$ に対して $(\check{U}(z + \sigma_1), \check{c})$ も解となる。ここで phase condition として、次の式が最小となる $\sigma_1 \in \mathbb{R}$ を与えます：

$$M(\sigma_1) := \int_{-L}^L \|\check{U}(z + \sigma_1) - \bar{U}(z)\|_2^2 dz.$$

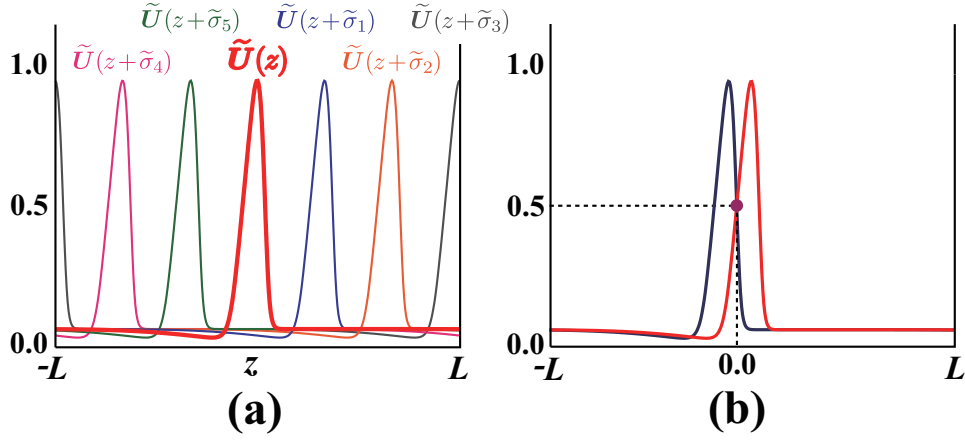


図 A.1: (A.1) の phase condition の説明図. (a) 空間方向のシフトの自由度により無限個のパルス波が存在する. (b) シフトの自由度を取り除くために, $U(0) = 0.5$ を満たすパルス波を条件として与えると, 無限個存在するパルス波は2つに選択される.

ただし, $\|\cdot\|_2$ はユークリッドノルムです. $\sigma_1 = \check{\sigma}_1$ のとき, $M(\sigma_1)$ が最小値になるように, $dM(\check{\sigma}_1)/d\sigma_1 = 0$ とする. この条件から次の式を得ます:

$$\int_{-L}^L (\check{U}(z + \check{\sigma}_1) - \bar{U}(z)) \cdot \check{U}_z(z + \check{\sigma}_1) dz = 0. \quad (\text{A.2})$$

(A.2) に対して $U(z) := \check{U}(z + \check{\sigma}_1)$ と置き, 部分積分を用いると次の式を得ます:

$$\frac{1}{2} [\|U(z)\|^2]_{-L}^L - [\bar{U}(z) \cdot U(z)]_{-L}^L + \int_{-L}^L \bar{U}_z(z) \cdot U(z) dz = 0. \quad (\text{A.3})$$

周期境界条件の場合, (A.3) は次のように表される:

$$\int_{-L}^L \bar{U}_z(z) \cdot U(z) dz = 0. \quad (\text{A.4})$$

A.1.3 位相条件 3

位相条件 (A.4) は周期境界条件下での解構造を求める位相条件としては有効ですが, 進行波のような解に対する位相条件としては有効ではありません. 次の位相条件は (A.4) に比べ, 解の形状を考慮する必要性が低いため汎用性があります. 次の式が最小となる位相条件を考えます:

$$M(\sigma_2) := \int_{-L}^L \|\check{U}_z(z + \sigma_2) - \bar{U}_z(z)\|_2^2 dz. \quad (\text{A.5})$$

(A.5) は下に凸の汎関数であるから最小となるためには

$$\int_{-L}^L (U''(z + \sigma_2) - \bar{U}''(z)) \cdot U'(z + \sigma_2) dz = 0$$

となります. ここで, $\sigma = 0$ において条件 $\lim_{z \rightarrow -\infty} U_z(z) = \lim_{z \rightarrow \infty} U_z(z)$ を満たせば, 同様に

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

を得ます.

$$D\bar{U}_{zz} + \bar{c}\bar{U}_z + \mathbf{F}(\bar{U}) = \mathbf{0}$$

から

$$\int_{-L}^L (\bar{c}\bar{U}_z(z) + \mathbf{F}(\bar{U})) \cdot \mathbf{U}_z(z) dz = 0. \quad (\text{A.6})$$

となります. 位相条件 (A.6) は進行波, 進行パルス波等に有効です.

A.2 時間方向の位相条件

本節では, 脈動解のシフトの自由度を取り除くために, 時間方向の位相条件を導出します. 時間方向の位相条件は空間方向の位相条件の導出と同じです. 例えば, (A.4) に対応する時間方向の位相条件は, $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ を $\alpha, \beta \in [-L, L]$ として, 次の式が最小となる $\sigma_3 \in \mathbb{R}$ を与えます:

$$M(\sigma_3) := \int_0^1 \int_{\alpha}^{\beta} \|\tilde{\mathbf{U}}(\tau + \sigma_3, z) - \bar{\mathbf{U}}(\tau, z)\|_2^2 dz d\tau.$$

ただし, $\tau = t/T$, $(\bar{\mathbf{U}}, \bar{T}, \bar{c}, \bar{\lambda}) \in \mathbb{R}^{M+3}$ と $(\tilde{\mathbf{U}}, \tilde{T}, \tilde{c}, \tilde{\lambda} + \Delta\lambda) \in \mathbb{R}^{M+3}$ は脈動解とします. 位相条件の導出方法は (A.4) の導出と同じ手順で求めることができ, 時間周期解であることから次の式を得ます:

$$\int_0^1 \int_{\alpha}^{\beta} (D\bar{U}_{zz}(\tau, z) + \bar{c}\bar{U}_z(\tau, z) + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(\tau, z))) \cdot \mathbf{U}(\tau, z) dz d\tau = 0.$$

ただし, $\bar{\mathbf{U}}_{\tau} = \bar{T} (D\bar{U}_{zz}(\tau, z) + \bar{c}\bar{U}_z(\tau, z) + \mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}(\tau, z)))$ を用いました.

付 録 B 解の枝の数値計算法

本節では M 元連立非線形方程式

$$\mathbf{F}(\mathbf{u}(\lambda), \lambda) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F} : \mathbb{R}^{M \times 1} \rightarrow \mathbb{R}^M \quad (\text{B.1})$$

に対して、パラメータ λ を変化させながら (B.1) の解 $(\mathbf{u}, \lambda) \in \mathbb{R}^M \times \mathbb{R}$ を求める方法について説明します. (B.1) の解法には Newton 法を用いる. ここでは、(B.1) の解の 1 つ $(\mathbf{u}_1, \lambda_1)$ が求まっていると仮定し、 λ_1 に微小なパラメータ変化量 $\Delta\lambda$ を与えたときの $\lambda_2 = \lambda_1 + \Delta\lambda$ に対する (B.1) の解 $(\mathbf{u}_2, \lambda_2)$ を Newton 法で求めることを考えます. このとき、Newton 法の初期値として最も簡単な方法は

$$\mathbf{u}_2^{(0)} = \mathbf{u}_1 \quad (\text{B.2})$$

と与えることです (図 B.1). 解の枝は連続的につながっているため、パラメータの変化量 $\Delta\lambda$ を小さくとれば、Newton 法により解 $(\mathbf{u}_2, \lambda_2)$ が求まると期待できます. 初期値の与え方のもう 1 つの例として、解の枝の接線ベクトル上に初期値を与える方法があります. すなわち、 $(\mathbf{u}_1, \lambda_1)$ に対する (B.1) の接線方程式

$$\mathbf{F}\mathbf{u}(\mathbf{u}_1, \lambda_1)\dot{\mathbf{v}}_1 = -\mathbf{F}_\lambda(\mathbf{u}_1, \lambda_1)$$

を解いて $\dot{\mathbf{v}}_1$ を求め

$$\tilde{\mathbf{u}}_2^{(0)} = \mathbf{u}_1 + \Delta\lambda\dot{\mathbf{v}}_1 \quad (\text{B.3})$$

を Newton 法の初期値として与えることです (図 B.2). しかしながら、図 B.1 や図 B.2 による方

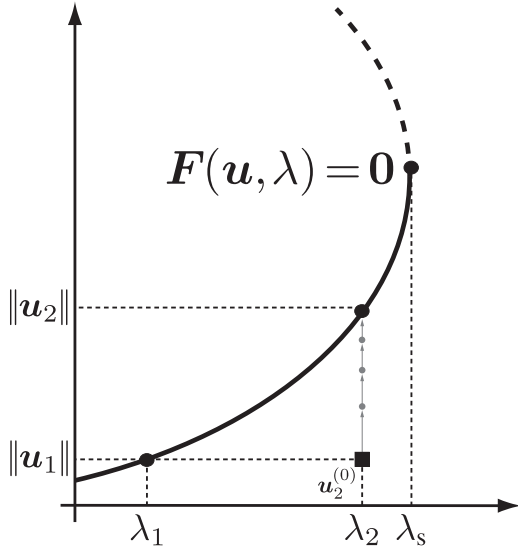


図 B.1: (B.2) を初期値に与えて Newton 法を用いた場合の模式図.

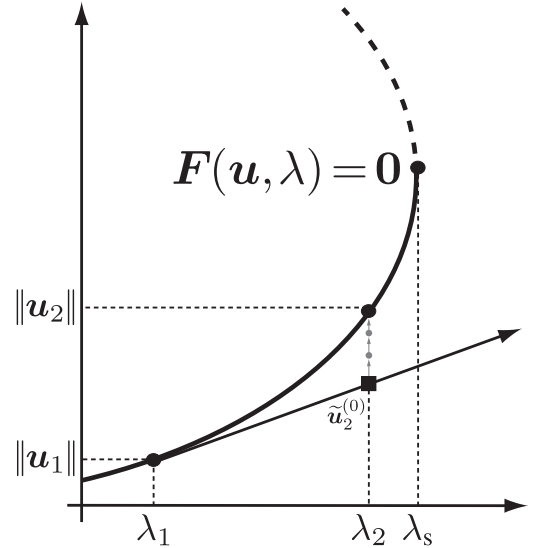


図 B.2: (B.3) を初期値に与えて Newton 法を用いた場合の模式図.

法では $\lambda = \lambda_s$ に saddle-node 分岐点を持つ場合、その分岐点後の解の枝を自動的に追跡すること

ができません。この解決策の1つとして、pseudo-arclength continuation 法 [22] を用います。この方法の原理は、図 B.3 のように解の枝の接線ベクトル $\mathbf{b}$ に対して垂直な方向へ解を収束させることです。このとき、解の枝の接線方向を新しいパラメータ座標系 (s 座標と呼ぶ) として Newton 法を適用するため、 λ は未知数として扱い、 $(\mathbf{u}, \lambda)$ は s の関数となります： $(\mathbf{u}, \lambda) = (\mathbf{u}(s), \lambda(s))$ 。パラメータの変化量 Δs は s 座標軸に与え、 $\Delta s = s_2 - s_1$ とします。図 B.3 の $\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ はそれぞれ $\mathbf{a} = (\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1, \lambda_2 - \lambda_1)$ 、 $\mathbf{b} = (\dot{\mathbf{u}}_1, \dot{\lambda}_1)$ 、 $\|\mathbf{b}\| = 1$ であり、 θ は $\mathbf{a}$ と $\mathbf{b}$ のなす角です。このとき、関係式 $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \cos \theta$ から

$$(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) \cdot \dot{\mathbf{u}}_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - (s_2 - s_1) = 0$$

を得ます。従って、 $(\mathbf{u}_2, \lambda_2)$ を求めるには、次の $(M+1)$ 元連立非線形方程式を Newton 法で解くことに帰着します：

$$\begin{cases} \mathbf{F}(\mathbf{u}(s), \lambda(s)) = \mathbf{0}, \\ K(\mathbf{u}(s), \lambda(s); s) := (\mathbf{u} - \mathbf{u}_1) \cdot \dot{\mathbf{u}}_1 + (\lambda - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - (s - s_1) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

ただし、 $s = s_2$ です。このとき、Newton 法の初期値として、例えば、次のように与えます：

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mathbf{u}}_2^{(0)} \\ \tilde{\lambda}_2^{(0)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \\ \lambda_1 \end{pmatrix} + \Delta s \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}}_1 \\ \dot{\lambda}_1 \end{pmatrix}.$$

(B.4) に対して Newton 法を用いて計算するためには、 $(\dot{\mathbf{u}}_1, \dot{\lambda}_1)$ が既知の値である必要があります。そのため Newton 法により解を求めた後、新しい解を求めるための準備段階として、次の接線ベクトルの計算を行う必要があります。 $(\dot{\mathbf{u}}_1, \dot{\lambda}_1)$ が既知の値として、次の接線方向 $(\dot{\mathbf{u}}_2, \dot{\lambda}_2)$ を求めるためには、 $(\mathbf{u}_2, \lambda_2)$ に対する (B.4) の接線方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{F}_{\mathbf{u}}(\mathbf{u}_2, \lambda_2) & \mathbf{F}_{\lambda}(\mathbf{u}_2, \lambda_2) \\ \dot{\mathbf{u}}_1 & \dot{\lambda}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{\mathbf{u}}_{2,t} \\ \dot{\lambda}_{2,t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

から $(\dot{\mathbf{u}}_{2,t}, \dot{\lambda}_{2,t})$ を求め、接線ベクトルの正規化

$$\dot{\mathbf{u}}_2 = \frac{\dot{\mathbf{u}}_{2,t}}{\|(\dot{\mathbf{u}}_{2,t}, \dot{\lambda}_{2,t})\|_2}, \quad \dot{\lambda}_2 = \frac{\dot{\lambda}_{2,t}}{\|(\dot{\mathbf{u}}_{2,t}, \dot{\lambda}_{2,t})\|_2}$$

を行います。ただし、 $\|\cdot\|_2$ はユークリッドノルムです。この場合、一番最初のステップの接線ベクトルはわかっていないため、最初の接線ベクトルは近似的に与える必要があります。その方法の1つとして、(B.1) の2つの解 $(\mathbf{u}_0, \lambda_0)$ 、 $(\mathbf{u}_1, \lambda_1)$ を用意し

$$\dot{\mathbf{u}}_{1,t} = \frac{\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_0}{\lambda_1 - \lambda_0}, \quad \dot{\lambda}_{1,t} = 1$$

を求め、 $(\dot{\mathbf{u}}_{1,t}, \dot{\lambda}_{1,t})$ を正規化したベクトル $(\dot{\mathbf{u}}_1, \dot{\lambda}_1)$ を

$$\dot{\mathbf{u}}_1 = \frac{\dot{\mathbf{u}}_{1,t}}{\|(\dot{\mathbf{u}}_{1,t}, \dot{\lambda}_{1,t})\|_2}, \quad \dot{\lambda}_1 = \frac{\dot{\lambda}_{1,t}}{\|(\dot{\mathbf{u}}_{1,t}, \dot{\lambda}_{1,t})\|_2}$$

として求めます。それを最初のステップの接線ベクトルとして用います。

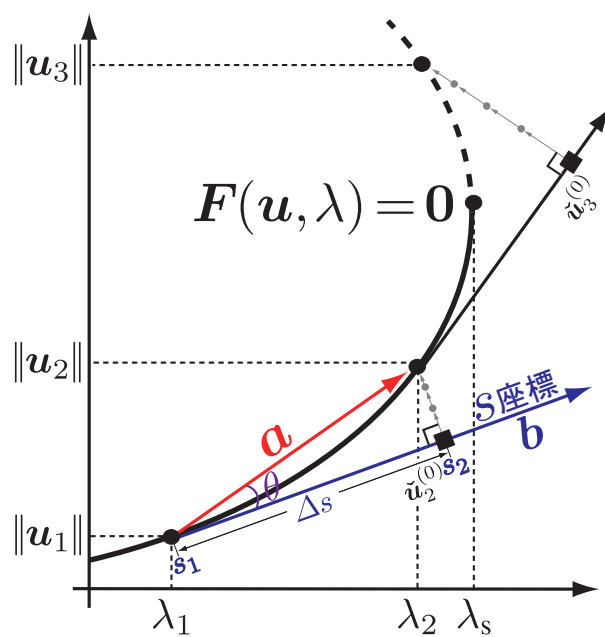


図 B.3: pseudo-arclength continuation 法を用いたときの Newton 法の模式図.

付 録 C 反応拡散系の数値計算法

反応拡散系に対する解構造をニュートン法を用いて求めるとき、ニュートン法の初期値を適切に与える必要があります。適切な初期値として時間発展方程式から求めた数値解を選ぶことが多くあります。反応拡散系の数値計算法を知らない人が、解構造の数値計算を行うとは考えにくいですが、念のため、空間 1 次元 2 変数反応拡散系に対する数値計算を周期境界条件のもとで求める方法について解説しておきます：

$$\begin{cases} u_t = d_u u_{xx} + f(u, v, \mu_1), \\ v_t = d_v v_{xx} + g(u, v, \mu_2), \end{cases} \quad 0 < t, \quad x \in [-L, L], \quad (\text{C.1})$$

$$(u, v)(t, -L) = (u, v)(t, L), \quad (u_x, v_x)(t, -L) = (u_x, v_x)(t, L) \quad (\text{C.2})$$

(C.1), (C.2) に対して差分化を行います。適当な Δt を与え、区間 $2L$ を N 等分して $\Delta x = L/N$ とおき

$$t_k = (k-1) \times \Delta t, \quad 1 \leq k,$$

$$x_i = -L + (i-1) \times \Delta x, \quad 1 \leq i \leq N,$$

$$u_i^k \equiv u(t_k, x_i), \quad v_i^k \equiv v(t_k, x_i)$$

とします。(C.1) に対して中心差分近似を行うと

$$\begin{cases} \frac{u_i^{k+1} - u_i^k}{\Delta t} = d_u \frac{u_{i-1}^{k+1} - 2u_i^{k+1} + u_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2} + f(u_i^k, v_i^k), \\ \frac{v_i^{k+1} - v_i^k}{\Delta t} = d_v \frac{v_{i-1}^{k+1} - 2v_i^{k+1} + v_{i+1}^{k+1}}{\Delta x^2} + g(u_i^k, v_i^k), \end{cases} \quad 1 \leq i \leq N, \quad (\text{C.3})$$

を得ます。また、周期境界条件 (C.2) より

$$\begin{cases} u_0 = u_N, \quad u_{N+1} = u_1, \\ v_0 = v_N, \quad v_{N+1} = v_N \end{cases} \quad (\text{C.4})$$

を得ます。ただし拡散項は陰的に解くことにします。これは Δt を大きくとったときに数値計算が不安定化することを防ぐためです。(C.1) を i について整理すると

$$\begin{cases} -R_u u_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_u) u_i^{k+1} - R_u u_{i+1}^{k+1} = u_i^k + \Delta t f(u_i^k, v_i^k), \\ -R_v v_{i-1}^{k+1} + (1 + 2R_v) v_i^{k+1} - R_v v_{i+1}^{k+1} = v_i^k + \Delta t g(u_i^k, v_i^k) \end{cases} \quad (\text{C.5})$$

となります。ただし、 R_u, R_v は

$$R_u = d_u \frac{\Delta t}{\Delta x^2}, \quad R_v = d_v \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{C.6})$$

を表します。これより (C.5), (C.6) を行列を用いて表すと次のように書けます：

$$\begin{pmatrix}
1+2R_u & -R_u & 0 & \cdots & 0 & -R_u & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
-R_u & 1+2R_u & -R_u & 0 & \cdots & 0 & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & -R_u & 1+2R_u & -R_u & \vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots \\
-R_u & 0 & \cdots & 0 & -R_u & 1+2R_u & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
\hline
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & 1+2R_v & -R_v & 0 & \cdots & 0 & -R_v \\
\vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots & -R_v & 1+2R_v & -R_v & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\
\vdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \vdots & 0 & \cdots & 0 & -R_v & 1+2R_v & -R_v \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -R_v & 0 & \cdots & 0 & -R_v & 1+2R_v
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1^{k+1} \\
u_2^{k+1} \\
\vdots \\
\vdots \\
\vdots \\
u_{N-1}^{k+1} \\
u_N^{k+1} \\
\hline
v_1^{k+1} \\
v_2^{k+1} \\
\vdots \\
\vdots \\
v_{N-1}^{k+1} \\
v_N^{k+1}
\end{pmatrix}
= \begin{pmatrix}
u_1^k + \Delta t f(u_1^k, v_1^k) \\
u_2^k + \Delta t f(u_2^k, v_2^k) \\
\vdots \\
\vdots \\
u_{N-1}^k + \Delta t f(u_{N-1}^k, v_{N-1}^k) \\
u_N^k + \Delta t f(u_N^k, v_N^k) \\
\hline
v_1^k + \Delta t g(u_1^k, v_1^k) \\
v_2^k + \Delta t g(u_2^k, v_2^k) \\
\vdots \\
\vdots \\
v_{N-1}^k + \Delta t g(u_{N-1}^k, v_{N-1}^k) \\
v_N^k + \Delta t g(u_N^k, v_N^k)
\end{pmatrix}. \tag{C.7}$$

この連立1次方程式は、1行目から N 行目まで方程式と $N+1$ 行目から $2N$ 行目の方程式が独立しています。そのため、(C.7) の $(u_1^{k+1}, \dots, u_N^{k+1})$ を求める連立方程式と $(v_1^{k+1}, \dots, v_N^{k+1})$ を求める連立方程式は独立させて解くことができます。これらの連立方程式を計算するに例えば周期境界条件による3重対角行列用のLU分解を用いればよいことがわかります。これより時間 $(k+1) \times \Delta t$ の解が求まるので、時間 $(k+2) \times \Delta t$ を求めたければ $(k+1) \times \Delta t$ で求めた解を初期値として同じ計算をすれば、離散化された全ての時間の解を求めることができます。

付 録 D Newton 法

D.1 Simple Newton 法

非線形方程式を解くための 1 つの方法として Newton 法があります。その数値計算法を説明します。ここで考える問題は滑らかな関数 $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ を $\mathbf{F} : \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^N$, $\mathbf{U} \in \mathbf{R}^N$ とおいたときに

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0} \quad (\text{D.1})$$

を満たす $\mathbf{U}$ を求めることとします。いま $\mathbf{U} = \boldsymbol{\alpha}$ は (D.1) の解だと仮定します：

$$\mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{0} \quad (\text{D.2})$$

このとき $\mathbf{F}(\mathbf{U})$ を $\mathbf{U}^{(1)} = \boldsymbol{\alpha} - \Delta\mathbf{U}$ の回りでテイラー展開し、 $\mathbf{U} = \boldsymbol{\alpha}$ とおくと

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\boldsymbol{\alpha}) &= \mathbf{F}(\mathbf{U}^{(1)}) + \mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(1)})\Delta\mathbf{U} + o(\Delta\mathbf{U}^2) \\ &\approx \mathbf{F}(\mathbf{U}^{(1)}) + \mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(1)})\Delta\mathbf{U} \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

となります。ただし、 $\Delta\mathbf{U}$ は十分小さな値、 $\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(1)})$ は $N \times N$ のヤコビ行列です。ここで、 $\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(1)})$ が正則行列でなら (D.2), (D.3) より

$$\Delta\mathbf{U} = -[\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(1)})]^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{U}^{(1)}) \quad (\text{D.4})$$

となります。 $\mathbf{U}^{(2)} = \mathbf{U}^{(1)} + \Delta\mathbf{U}$ とおけば、 $\mathbf{U}^{(2)}$ は $\mathbf{U}^{(1)}$ より真解 $\boldsymbol{\alpha}$ に近い解となります。これを繰り返して

$$\mathbf{U}^{(m+1)} = \mathbf{U}^{(m)} - [\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(m)})]^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{U}^{(m)}), \quad m \geq 1 \quad (\text{D.5})$$

より $\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}$ の近似解を求める方法を Newton 法といいます。 $\mathbf{U}^{(m)}$ の上添え字の m は Newton 法の反復回数を表します。反復回数の度に解が収束しているかどうか確かめる必要があるため、その収束条件として例えば次のようなものを採用します：

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{U}^{(m+1)})\| \leq N\varepsilon. \quad (\text{D.6})$$

ここで、ノルムはユークリッドノルムを用います。ところで、(D.5) において逆行列 $[\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(m)})]^{-1}$ を数値的に求めることは非効率的なので、連立 1 次方程式

$$[\mathbf{DF}(\mathbf{U}^{(m)})] \mathbf{X} = \mathbf{F}(\mathbf{U}^{(m)}) \quad (\text{D.7})$$

の解 $\mathbf{X}$ を求め

$$\mathbf{U}^{(m+1)} = \mathbf{U}^{(m)} - \mathbf{X}$$

とおけば (D.5) の反復計算を行うことができます。最後に (D.7) を LU 分解法を用いて解く Newton 法のアルゴリズムを C 言語風に書いたものを下記に表します。

```

 $U^{(1)} = U_1;$                                 /*  $U_1$  は初期値 */
for(  $m=1$ ;  $m \leq MI$ ;  $m++$  ){                /*  $MI$  は最大反復回数 */
     $F(U^{(m)})$  を作る;                        /*  $F(U^{(m)})$  は (D.7) の右辺の部分 */
     $NORM = \|F(U^{(m)})\|;$ 
    if(  $NORM \leq N * \varepsilon$  ) break;        /* 解の収束判定条件 */
     $DF(U^{(m)})$  を作る;                        /*  $DF(U^{(m)})$  は (D.7) のヤコビ行列 */
     $DF(U^{(m)})$  を  $LU$  分解する;
     $LUX = F(U^{(m)})$  から  $X$  を求める;
     $U^{(m+1)} = U^{(m)} - X;$                 /* 解の更新 */
}
    
```

D.2 擬似ニュートン法

(D.7) の計算を LU 分解法 を用いて解くと $N \times N$ ヤコビ行列であるなら LU 分解の計算に $o(N^3)$ の計算回数を必要とします. 一方, 前進消去・後退代入の計算には $o(N^2)$ の計算回数で済みます. このように LU 分解の計算コストが大きく, Newton 法の計算は反復する度にヤコビ行列を作り直してるため一回の反復に少なくとも $o(N^3)$ の計算時間を必要とします. そこで, 計算時間を大幅に減らす方法を考えます. 解が収束すれば良いという考え方なら, 毎回ヤコビ行列を作り直す作業を止めて, 反復に入る前に最初にヤコビ行列を作っておき, 反復を開始した後は最初に作ったヤコビ行列を用いることを考えます. つまり, (D.5) の替わりに

$$U^{(m+1)} = U^{(m)} - [DF(U^{(1)})]^{-1} F(U^{(m)}), \quad m \geq 1 \quad (D.8)$$

を用います. (D.5) と (D.8) の違いはヤコビ行列の反復添え字の個所が異なるだけです. この方法は擬似 Newton 法と呼ばれます. しかし, この方法は (D.5) のヤコビ行列の近似値を用いているため初期値が真解に十分近くなければ発散する可能性が大きくなります. そのため, Newton 法と擬似 Newton 法を混合した方法を導入します. つまり, 反復回数の最初の数回は Newton 法を用いてある程度解が真解に近づいたと判定したら, 次回からはその解を初期値だとして擬似 Newton 法を用いる方法です. Newton 法と擬似 Newton 法を入れ替える方法の 1 つの例として次のような方法が考えられます:

ある定数 M を用意して, $NORM = \|F(U^{(m)})\|$ とおいたとき

$NORM > M$ を満たすならば ニュートン法,

$NORM \leq M$ を満たすならば 擬似ニュートン法

を用います.

擬似 Newton 法または Newton 法と擬似 Newton 法を混合した方法により, 定常解及び進行波解の数値計算は本来の Newton 法よりも高速に計算することができます. 最後に, Newton 法と擬似 Newton 法を混合したアルゴリズムを下記に表す.

```

 $U^{(1)} = U_1;$                                 /*  $U_1$  は初期値 */
for(  $m=1$ ;  $m \leq MI$ ;  $m++$  ){                /* MI は最大反復回数 */
     $F(U^{(m)})$  を作る;                        /*  $F(U^{(m)})$  は (D.7) の右辺の部分 */
     $NORM = \|F(U^{(m)})\|;$ 
    if(  $NORM \leq N * \varepsilon$  ) break;        /* 解の収束判定条件 */
    if(  $NORM > M$  ){                          /* Newton 法と擬似 Newton 法の採用判定条件 */
         $DF(U^{(m)})$  を作る;                    /*  $DF(U^{(m)})$  は (D.7) のヤコビ行列 */
         $DF(U^{(m)})$  を LU 分解する;
    }
     $LUX = F(U^{(m)})$  から  $X$  を求める;
     $U^{(m+1)} = U^{(m)} - X;$                   /* 解の更新 */
}

```

このアルゴリズムは、主に Newton 法のアルゴリズムに

$if(NORM > M)\{$

の部分加わえられただけです。なお、擬似 Newton 法だけを扱いたい場合はこの部分を

$if(m == 1)\{$

と書き換えれば良いです。

D.3 Keller's Equation 付きの Newton 法

最後に、擬弧長法の方程式を導入した場合の Newton 法のアルゴリズムを下記に示します。

```

( $\mathbf{w}_0, \lambda_0$ ) を用意する; /* ( $\mathbf{w}_0, \lambda_0$ ) は  $\lambda_0$  における解  $\mathbf{w}_0$  */
( $\mathbf{w}_1^{(1)}, \lambda_1^{(1)}$ ) = ( $\mathbf{w}_1, \lambda_1$ ) を用意する; /* ( $\mathbf{w}_1, \lambda_1$ ) は  $\lambda_1$  における解  $\mathbf{w}_1$  */
( $\dot{\mathbf{w}}_0, \dot{\lambda}_0$ ) を作る; /* 初期方向ベクトル (??), (??) の計算 */
for(  $s=1$ ;  $s \leq MS$ ;  $s++$  ){ /* MS は最大ステップ回数 */
    for(  $n=1$ ;  $n \leq MI$ ;  $n++$  ){ /* MI は最大反復回数 */
         $\mathbf{H}(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)})$  を作る; /* (??) の右辺の部分 */
         $NORM = \|\mathbf{H}(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)})\|$ ;
         $\mathbf{DH}(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)})$  を作る; /* (??) のヤコビ行列の部分 */
         $\mathbf{DH}(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)})$  を LU 分解する;
        if(  $NORM \leq (N+1) * \varepsilon$  ) break; /* 解の収束判定条件 */
         $\mathbf{LUX} = \mathbf{H}(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)})$  から  $\mathbf{X}$  を求める;
         ${}^t(\mathbf{w}_s^{(n+1)}, \lambda_s^{(n+1)}) = {}^t(\mathbf{w}_s^{(n)}, \lambda_s^{(n)}) - \mathbf{X}$ ; /* 解とパラメータの更新 */
    }
     $\mathbf{LUX} = {}^t(0, \dots, 0, 1)$  から  $\mathbf{X}$  を求める; /* 方向ベクトルの計算 */
     ${}^t(\dot{\mathbf{w}}_s, \dot{\lambda}_s) = {}^t(\dot{\mathbf{w}}_{s-1}, \dot{\lambda}_{s-1}) - \mathbf{X}$ ; /* 方向ベクトルの更新 */
    ( $\dot{\mathbf{w}}_s, \dot{\lambda}_s$ ) を規格化する;
    output( $\mathbf{w}_s, \lambda_s$ );
}

```

付 録 E 連立 1 次方程式の数値解法

この節では、疎行列と密行列が混在する連立一次方程式の数値計算法について解説します。 $N \times N$ のヤコビ行列に対して直接法を用いて数値計算をする場合、LU 分解法や Gauss 消去法を用いて計算すると計算量は $o(N^3)$ となるため Newton 法の反復解法に時間がかかります。大規模な分岐計算を有効な時間範囲内で計算するためには数値計算法を工夫する必要があります。疑似弧長法 (Keller's Equation) や時間・空間の位相条件を加えた Newton 法では疎行列 A と密行列 B, C, D の組み合わせた次の連立一次方程式を計算する必要があります：

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (\text{E.1})$$

ここで、 A は $N \times N$ 、 D は $K \times K$ の正方行列、 B は $N \times K$ 、 C は $K \times N$ の帯行列、 $\mathbf{x}$ と $\mathbf{f}$ は N 次元ベクトル、 $\mathbf{y}$ と $\mathbf{g}$ は K 次元ベクトルとします。ただし、 N は離散化したときの方程式の変数の数であり、 $K = 1, 2, 3$ です。以下は $K = 3$ として説明します。

(E.1) を次のように書きます：

$$A\mathbf{x} + B\mathbf{y} = \mathbf{f}, \quad (\text{E.2})$$

$$C\mathbf{x} + D\mathbf{y} = \mathbf{p}. \quad (\text{E.3})$$

ここで

$$\bar{B} = (b_1, b_2, b_3), \quad \bar{B} = (\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3) \quad (\text{E.4})$$

として連立一次方程式

$$A\bar{b}_i = b_i, \quad (i = 1, 2, 3) \quad (\text{E.5})$$

を解きます。 A が逆行列を持っているならば¹

$$\bar{B} = A^{-1}B \quad (\text{E.6})$$

となります。次に連立一次方程式

$$A\bar{\mathbf{f}} = \mathbf{f} \quad (\text{E.7})$$

を解くと

$$\bar{\mathbf{f}} = A^{-1}\mathbf{f} \quad (\text{E.8})$$

を得ます。従って、(E.2) から

$$\mathbf{x} = A^{-1}(\mathbf{f} - B\mathbf{y}) = \bar{\mathbf{f}} - \bar{B}\mathbf{y} \quad (\text{E.9})$$

となります。(E.3) から

$$D\mathbf{y} = \mathbf{p} - C(\bar{\mathbf{f}} - \bar{B}\mathbf{y}), \quad (\text{E.10})$$

$$(D - C\bar{B})\mathbf{y} = \mathbf{p} - C\bar{\mathbf{f}} \quad (\text{E.11})$$

¹A に逆行列が存在しなくても、(E.5) の解が存在すればよいです。

を得ます。ここで、 $D - C\bar{B}$ は $K \times K$ の正方行列であるから、逆行列が存在するならば

$$\mathbf{y} = (D - C\bar{B})^{-1}(\mathbf{p} - C\bar{\mathbf{f}}) \quad (\text{E.12})$$

となります。(E.12) を (E.9) に代入すると、 $\mathbf{x}$ を求めることができます。

この計算法の中で連立一次方程式 (E.5) と (E.7) は定常解の数値計算で用いた LUCGS 法等の反復解法で高速に解くことができ、分岐点近傍²でも問題なく計算できます。また、連立一次方程式 (E.11) は最大でも 3 次元なので直接法で数値計算しても全く問題ありません。

² A が実部 0 に近い固有値を持っていたとしても解くことができます

付 録 F 解の枝の切り換え

定常解において、Pitch-fork 分岐が起きたとき、そこから新しい解の枝が分岐します。この節では、新しい解枝を数値計算によって求める方法を解説します。ここでは、パラメータ λ を変化させたとき、定常パルス波から進行パルス波への分岐点 λ_p を見つけたとき定常パルス波の枝から進行パルス波への枝にスイッチする 1 つの方法を説明します。この分岐は drift 分岐と呼ばれており、図 (F.1(a)) のように安定定常パルス波から安定進行パルス波が分岐するときは超臨界型 drift 分岐と呼ばれており、図 (F.1(b)) のように安定定常パルス波から不安定進行パルス波が分岐するときは亜臨界型 drift 分岐と呼ばれています。

ここでは 1 次元 n 変数反応拡散方程式系に対し定常パルス波の枝から進行パルス波の枝にスイッチする方法を説明します¹。まずパラメータ λ は進行パルス波が存在するような領域にとります。図 (F.1(a)) のような状況を考え、 $\Delta\lambda$ をある程度小さな正の値にとり

$$\lambda_{ini} = \lambda_p + \Delta\lambda$$

とにおいて $\lambda = \lambda_{ini}$ に対する進行パルス波を求めることを考えます。このとき進行パルス波の解の枝を求めるための初期値を与えるために、(1) ピッチフォーク分岐点での定常パルス波 U_p 、(2) ピッチフォーク分岐点での分岐を起こす 0 固有値 μ_0 に対する固有関数 $\Psi_p(\mu_0)$ を用意します。ただし、周期境界条件のもとで定常問題を考えると必ず 0 固有値を 1 つもつので、分岐に対応しない 0 固有値に対する固有関数は除外します。これらに対して

$$\begin{aligned} U_{ini} &= U_p + \varepsilon \Psi_p(\mu_0), \\ c_{ini} &= \Delta c \end{aligned} \tag{F.1}$$

とにおいて、 (U_{ini}, c_{ini}) を初期値に与え 4.2 節の Keller's Equation を除いた Newton 法を用いて進行パルス波を求めます。ただし、 $\varepsilon, \Delta c$ はある程度小さな値で Δc は速度の補正量を表します。初期値 (F.1) から Newton 法により進行パルス波を求めることができれば、次からはその求まった進行パルス波を初期値にとりパラメータを動かすことによって、これまでと同じ方法で進行パルス波の枝を追うことができます。初期値 (F.1) はピッチフォーク分岐近傍による進行パルス波の近似解を表しているので、枝のスイッチに成功する可能性は極めて高いのですが、この方法で必ずしも進行パルス波の枝が求まるわけではないです。なぜなら、 $\Delta\lambda$ を大きくとり過ぎると、Newton 法による反復計算が発散したり定常パルス波に収束する可能性があるからです。また、 $\Delta\lambda$ を小さくとり過ぎると、分岐点の数値誤差により進行パルス波が存在しない範囲で計算することが起きるからです²。この辺は数値計算しないと分からない部分ですが、不安定な進行パルス波が分岐する場合はこの方法が大いに役に立ちます。なぜなら、これまで Newton 法によって進行パルス波を求めるための初期値として発展方程式から求まる進行パルス波を与えていましたが、発展方程式からは安定な解しか求まらないため、Newton 法で不安定進行パルス波を求めるための適切な初期値を発展方程式から与えることができないからです。

¹この方法は一般的なピッチフォーク分岐が起きたときの枝のスイッチ方法と同じです。

²定常問題から数値的に求めた分岐点の数値誤差によって進行パルス波の存在しないパラメータ範囲があります。

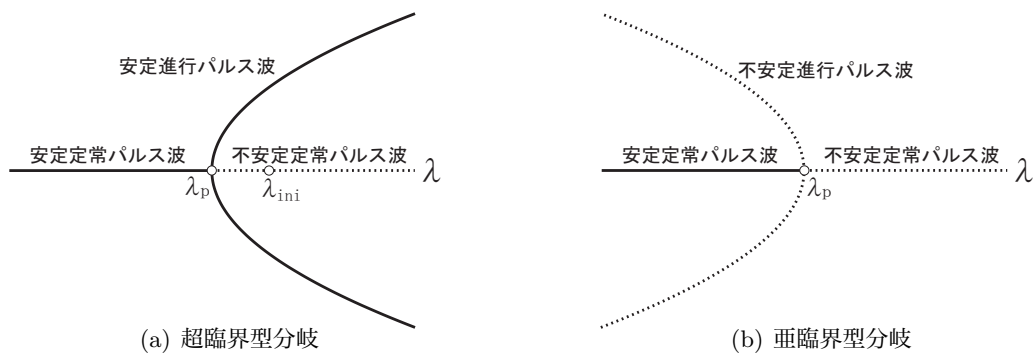


図 F.1: 定常パルス波からのピッチフォーク分岐点近傍の分岐図.

付 録 G ポアンカレマップ

周期解を求める手段としてポアンカレの方法があります。図 G.1 のように周期軌道 γ 上のある一点 P をとりその点 P と横断的に交わる曲面 Γ を考えます。この Γ をポアンカレ断面といいます。点 Q は点 P を含む Γ 上の近傍 Ω 内にとり、点 Q に対し時間発展させた解を $\varphi(t; Q)$ とおきます。もし、点 Q が点 P に十分近ければ $Q' = \varphi(T; Q)$ は点 P に近いところへ戻ってきます。このとき、点 Q から Q' への写像 T_Ω :

$$T_\Omega : \Gamma \supset \Omega \longrightarrow \Gamma; \quad Q \longmapsto Q' (= T_\Omega(Q))$$

について考えます。この T_Ω をポアンカレマップといいます。このとき、 $P = T_\Omega(P)$ から、点 P は写像 T_Ω の不動点となっています。今、初期値 Q から出発した解が時間周期 T 経過する度に Γ 上をプロットしていく点列 :

$$t_n(Q) = \{Q, T_\Omega(Q), T_\Omega^2(Q), \dots, T_\Omega^n(Q)\}$$

を考えます。もし点 Q があるポアンカレ断面上で

$$Q = T_\Omega(Q)$$

となれば点 Q は不動点であり、周期解の存在を示しています。さらに、周期軌道 Γ に対する不動点 P の Ω 近傍の点 Q を取り、点列 $\{t_n(Q)\}_{n=0}^\infty$ を考えますこのとき点列 $t_n(Q)$ が不動点 P に近づけば周期軌道 Γ は安定な周期軌道であり、点 P から離れていけば Γ は不安定な周期軌道であることが分かります。このように、周期解の存在やその安定性はポアンカレマップの性質を調べればよいことがわかります。

いま、周期軌道を求めるために、ポアンカレ断面上 Γ 上の不動点 P を見つける方法を考えます。適当な初期値 S に対し T 時間後の解 $\varphi(T; S)$ を求め、

$$H(S, T) \equiv \varphi(T; S) - S = 0$$

を満たすかどうか調べます。もし満たさなければ別の初期値を持って同じことを繰り返します。この方法は Shooting Method の一種ですが、不動点のおおよその場所は見つけることができても不動点自身を特定することは不可能に近いです。そこで Newton 法を取り入れた Shooting Method を使います。ここでは、 $H(S, T) = 0$ を満たすような初期値 S を Newton 法を用いて求める方法を採用します。簡単にいえば

$$DH(S, T) \Delta S = H(S, T)$$

を計算して初期値を調整する量 ΔS を求め、 $\tilde{S}$ を

$$\tilde{S} = S - \Delta S$$

とおけば、もし初期値 S が不動点に近ければ $\tilde{S}$ は S より不動点 P に近づきます。次に $\tilde{S}$ を初期値だと思って同じ作業を繰り返していけば不動点 P が求まるだろうと期待できます。この方法は Newton-Shooting Method[?] と呼ばれています。

では変数変換 $\tau = t/T$ をおこなった空間 1 次元 2 変数反応拡散系

$$\begin{cases} u_\tau = T(d_u u_{xx} + f(u, v, \lambda)), & 0 \leq \tau < 1, \quad 0 \leq x < L, \quad \lambda \in \mathbf{R}, \\ v_\tau = T(d_v v_{xx} + g(u, v, \lambda)), & 0 \leq \tau < 1, \quad 0 \leq x < L, \quad \lambda \in \mathbf{R} \end{cases} \quad (\text{G.1})$$

に対する周期解を Newton-Shooting Method で数値的に求めてくことを考えましょう. (G.1) を見れば分かるように方程式に未知数 T が加えられるので, 方程式の数よりも未知数の数の方が多いことが容易にわかります. そのために周期解の時間並進性に対する自由度を固定する位相条件を導入します. これは進行パルス波の数値計算において速度 c が未知数として加えられたときに空間方向の位相条件を導入した理由と同様です. さらに, 脈動進行パルス波を求めるときは (G.1) に対し, $z = x - ct$ と変数変換を行った方程式を扱うことになります. そのため未知数として c が加えられますが, これは空間方向の位相条件を導入することで解決します. つまり, 脈動進行パルス波を求めるには (G.1) に時空間方向の位相条件を加えた方程式系を Newton-Shooting Method で解くことが必要になるのです. 時間に対する位相条件は Appendix A を参照してください. 脈動定常パルス波や脈動進行パルス波の数値計算法については 3.3 節を参照してください.

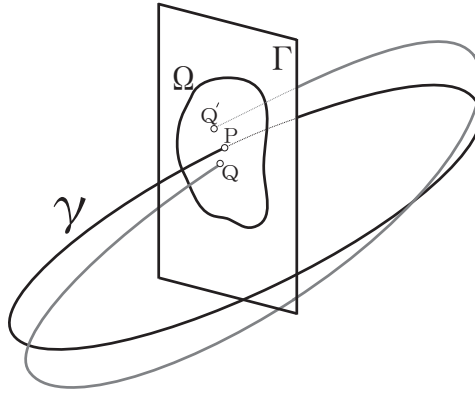


図 G.1: ポアンカレマップの概念図

参考文献

- [1] J. E. Pearson, *Complex patterns in a simple system*, Sciences, **261**(1993), 189–192.
- [2] V. Petrov, S. K. Scott and K. Showalter, *Excitability, wave reflection, and wave splitting in a cubic autocatalysis reaction-diffusion system*, Phil. Trans. Roy. Soc. London. A, **A347**(1994), 631–642.
- [3] W. N. Reynolds, J. E. Pearson and S. Ponce-Dawson, *Dynamics of self-replicating patterns in reaction diffusion systems*, Phys. Rev. Lett, **72**(1994), 1120–1123.
- [4] M. Mimura, M. Nagayama and K. Sakamoto, *Pattern dynamics in an exothermic reaction*, Physica D, **84**(1995), 58–71.
- [5] M. Mimura and M. Nagayama, *Nonannihilation dynamics in an exothermic reaction-diffusion system with mono-stable excitability*, Chaos, **7**(1997), 817–826.
- [6] Y. Nishiura and D. Ueyama, *A skeleton structure of self-replicating dynamics*, Physica D, **130**(1999), 73–104.
- [7] M. Mimura, M. Nagayama, H. Ikeda and T. Ikeda *Dynamics of travelling breathers arising in reaction-diffusion systems—ODE modelling approach*, Hiroshima Math. J. **30**(2000), 221–256.
- [8] Y. Nishiura and D. Ueyama, *Spatio-temporal chaos for the Gray-Scott model*, Physica D, **150**(2001), 137–162.
- [9] S. -I. Ei, M. Mimura and M. Nagayama, *Pulse-pulse interaction in reaction-diffusion systems*, Physica D, **165**(2002), 176–198.
- [10] S. -I. Ei, Y. Nishiura and K. -I. Ueda, *2n-Splitting or Edge-Splitting? A Manner of Splitting in Dissipative Systems*, Japan J. Indus. Appl. Math., **18**(2), 2003, 181–205.
- [11] Y. Nishiura, T. Teramoto and K. -I. Ueda, *Dynamic transitions through scatters in dissipative systems*, Chaos, **13**(2003), 962.
- [12] Y. Nishiura, T. Teramoto and K. -I. Ueda, *Scattering and separators in dissipative systems*, Phys. Rev. E, **67**(2003), 056210.
- [13] Y. Nishiura, T. Teramoto and K. -I. Ueda, *Scattering of traveling spots in dissipative systems*, Chaos, **15**(2005), 047509.
- [14] 三村昌泰編著, パターン形成とダイナミクス, 非線形・非平衡現象の数理4, 東京大学出版会, 2006.

- [15] T. Teramoto, K. Suzuki and Y. Nishiura, *Rotational motion of traveling spots in dissipative systems*, Phys. Rev. E, **80**(2009), 046208.
- [16] E. Doedel, H. B. Keller and J. P. Kernevez, *Numerical analysis and control of bifurcation problems: (I) Bifurcation in finite dimensions*, Int. J. Bif. Chaos, **1**(1991), 493–520.
- [17] E. Doedel, H. B. Keller and J. P. Kernevez, *Numerical analysis and control of bifurcation problems: (II) Bifurcation in infinite dimensions*, Int. J. Bif. Chaos, **1**(1991), 745–772.
- [18] H. Ikeda and T. Ikeda, *Bifurcation phenomena from standing pulse solutions in some reaction-diffusion systems*, J. Dynam. Diff. Eqns., **12**(2000), 117–167.
- [19] T. Ikeda, H. Ikeda and M. Mimura, *Hopf bifurcation of travelling pulses in some bistable reaction-diffusion systems*, Methods Appl. Anal., **7**(2000), 165–194.
- [20] W. -J. Beyn, *The numerical computation of connecting orbits in dynamical systems*, IMA J. Numer. Anal., **9**(1990), 379–405.
- [21] W. -J. Beyn, A. Champneys, E. Doedel, W. Govaerts, Y. A. Kuznetsov and B. Sandstede, *Numerical continuation, and computation of normal forms*, *Handbook of dynamical systems II*, ed B. Fiedler, North-Holland, Amsterdam, 2002, 149–219.
- [22] H. B. Keller, *Numerical solution of bifurcation and nonlinear eigenvalue problems*, in Applications of Bifurcation Theory, P. H. Rabinowitz, ed., Academic Press, New York, 1977, 359–384.
- [23] B. Sandstede, *Stability of travelling waves*, *Handbook of dynamical systems II*, ed B. Fiedler, North-Holland, Amsterdam, 2002, 983–1055.
- [24] T. J. Aprille and T. N. Trick, *Steady-state analysis of nonlinear circuits with periodic inputs*, Proc. IEEE, **60**(1972), 108–114.
- [25] T. J. Aprille and T. N. Trick, *A computer algorithm to determine the steady-state response of nonlinear oscillators*, IEEE Trans. Circuit Theory, **CT-19**(1972), 354–360.
- [26] H. B. Keller, *Numerical Methods for Two-Point Boundary Value Problems*, Blaisdell, Waltham, 1968.
- [27] R. Seydel, *Practical bifurcation and stability analysis. From equilibrium to chaos*, 2nd ed, Springer-Verlag, New York, 1994.
- [28] U. M. Ascher, R. M. M. Mattheij and R. D. Russell, *Numerical solution of boundary value problems for ordinary differential equations*, SIAM, Philadelphia, 1995.
- [29] C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni and T. A. Zang, *Spectral methods in fluid dynamics*, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [30] 石岡圭一, スペクトル法による数値計算入門, 東京大学出版会, 2004.