Gray-Scott モデルのトランジェント軌道に対する共変 Lyapunov ベクトルの引き戻しによる数値解析

山口 崇幸

広島大学理学研究科数学専攻

1 はじめに

Gray-Scott モデルは, 適切なパラメータと初期値の軌道が自己複製パターンを示すことが知られている. この軌道は定常解に収束していくトランジェント軌道である. 本研究では, このような軌道を特徴づけるために定常解における線形化系の固有ベクトル (実固有ベクトルの場合, 共変 Lyapunov ベクトルに一致する) をトランジェント軌道に沿って引き戻したベクトルを数値的に求めたることで, 軌道の接空間の構造を特徴づけることを試みた.

Gray-Scott モデルは, 反応拡散方程式の 1 つであり, 次で与えられる.

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_u \Delta u - uv^2 + F(1-u) \qquad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D_v \Delta v + uv^2 - (F+k)v \qquad (2)$$

これは, 化学物質 U と V の化学反応 $U+2V \to 3V$, $V \to P$ をモデルにしている. u と v はそれぞれ U と V の濃度を表し, D_u と D_v は対応する拡散係数である. また, F は U の流入, k は $V \to P$ の変化率を表す. 以下では, 1 次元の Gray-Scott モデルを考え, u, v は区間 $[0, L]$ で定義されているとする.

図 1 は 1 次元 Gray-Scott モデルの自己複製パターンを示す軌道の v を表示している. この自己複製パターンは, サドル・ノード分岐の階層構造と極限点の余韻によって説明される [NU99, Uey99]. k を分岐パラメータとする. v の山の数が 2 個, 4 個, ..., 10 個である定常解が現れるサドル・ノード分岐がほぼ同じパラメータで起こる. さらに, 各サドル・ノード分岐の 2 つの定常解の不安定多様体と安定多様体は, それぞれ異なる他のサドル・ノード分岐の定常解の安定多様体と不安定多様体に接続し, 階層構造をなしている.

このような条件の下で, 系がサドル・ノード分岐が起こるパラメータの少し前のパラメータである場合を考える. サドル・ノード分岐によって現れる定常解に近い状態の軌道は, 系のパラメータに関する連続性から軌道の変化量 (軌道の時間微分) は 0 に近い値をとる. そのため, 軌道はサドル・ノード分岐の定常解に近い値にしばらくとどまる. これは, 離散力学系における間欠性に対応し, 極限点の余韻と呼ばれる. さらに時間が経つと軌道は定常解から離れていき, サドル・ノード分岐の階層構造にしたがって次の定常解の近くに向かう. そこでまた極限点の余韻によりしばらくとどまる. このとき, 分岐図は図 2 のようになる. 図 1 の軌道の山が分裂するパターンはこのような仕組みにより引き起こされる.

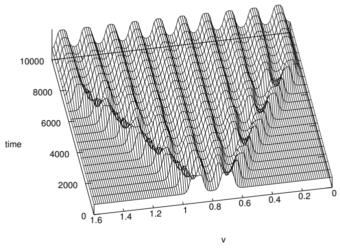

図 1　自己複製パターンを示す 1 次元 Gray-Scott モデルの v の時間発展．パラメータは $D_u = 2 \times 10^{-5}$, $D_v = 10^{-5}$, $F = 0.04$, $k = 0.06075$, $L = 1.6$.

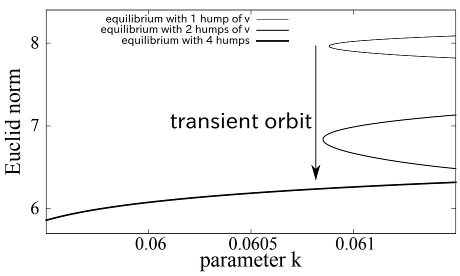

図 2　v の山が 2 個から 4 個に変化するパターンを示す 1 次元 Gray-Scott モデルの軌道の近くの分岐図．計算に用いたトランジェント軌道は, v の山が 2 個の定常解を生むサドル・ノード分岐の極限点の近くを通る．

2　固有ベクトルの引き戻し

トランジェント軌道に沿って定常解での線形化系の固有ベクトルを引き戻すために, 共変 Lyapunov ベクトルを求めるためのアルゴリズムである Ginelli et al. の方法 [GPT+07] を応用した．Ginelli et al. の方法は, まず接空間のベクトルを QR 分解しながら時間の正の方向に時間発展することによって収束させ, 次にそれらを時間の負の方向に引き戻して共変 Lyapunov ベクトルに収束させるアルゴリズムである．ベクトルを引き戻すときに, 正の方向の時間発展のときに得られる QR 分解の R を用いることで効率的に行えるということがこのアルゴリズムの要点である．

本研究では, トランジェント軌道に沿って接空間のベクトルを QR 分解をしながら時間発展させた．軌道が定常解に収束したところで, 十分に収束させて線形化系の固有ベクトル (共変 Lyapunov ベクトル) を求め, さらに引き戻しの段階をトランジェント軌道の部分まで適用した．

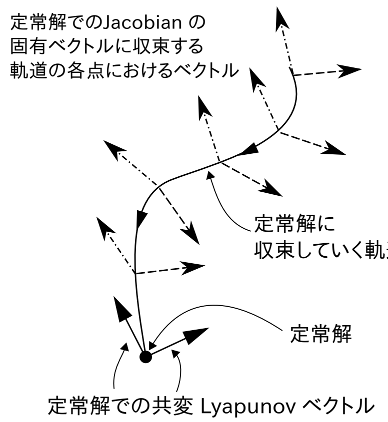

図 3　トランジェント軌道に Ginelli et al. の方法を適用した場合に得られる接空間のベクトルの概念図．

その結果, 図 3 のような定常解の線形化系の固有ベクトルをトランジェント軌道に沿って引き戻したベクトルを得た．このベクトルは軌道の各点での接空間のベクトルである．当然, このベクトルはトランジェント軌道に沿って時間発展すると収束先の定常解での線形化系の固有ベクトルに収束する．

3　Gray-Scott モデルに対する数値計算

Gray-Scott モデルに周期境界条件を課し, (1) と (2) を中心差分近似で常微分方程式に変換して軌道の計算を行った．u と v ともに 80 点に分割し, したがって系の次元は 160 である．

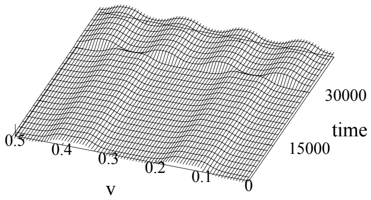

図 4　山が 2 個から 4 個に変化するパターンを示す 1 次元 Gray-Scott モデルの v の時間発展．パラメータは $D_u = 2 \times 10^{-5}$, $D_v = 10^{-5}$, $F = 0.04$, $k = 0.060851455688476566$, $L = 0.5$.

図 4 に示されているような v の山の数が 2 個から 4 個に変化する定常解に収束する軌道に対して解析を行った．L は 0.5 としており, u と v をそれぞれ 80 点に分割し, 時間の刻み幅は 0.5 とした．時間がおよそ 30000 のときに v の山の数が 2 個から 4 個に変化する軌道で, 分岐図においては図 2 に示されているように v の山の数が 2 個の定常解の極限点の近くを通り, 山の数が 4 個の定常解に収束する．この軌道を解析するために, 時間が 5000 から 35000 まで Ginelli et al. の方法で接空間のベクトルを求めた．定常解の共変 Lyapunov ベクトルまたはその引き戻しは軌道の各点で系の次元だけ存在し, 160 個すべてのベクトルを数値的に求めた．

図 5 は, 数値計算によって得られた 1 番目の定常解での共変 Lyapunov ベクトル, つまり, 最大 Lyapunov 指数に対応している共変 Lyapunov ベクトルとその引き戻しを表示している．得られたベクトルの各時刻の座標の値を区間 $[0, 1]$ にプロットし, ベクトルの時間発展を表示している．図 6 は最大 Lyapunov 指数とその引き戻しから計算した有限時間 Lyapunov 指数の時間変化を表示している．この有限時間 Lyapunov 指数は, 山が分裂している 30000 付近で激しく変化し, 分裂前と分裂後ではそれぞれほぼ一定の値をとる．

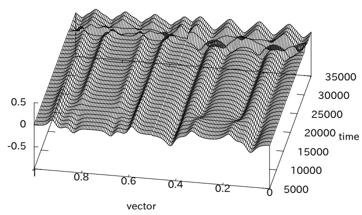

図 5　定常解における最大 Lyapunov 指数に対応する共変 Lyapunov ベクトルとその引き戻しの時間発展．共変 Lyapunov ベクトルは u と v の次元を合わせた 160 次元の接空間のベクトルであり, 0.0 から 0.5 までは u に対応する 80 次元の座標, 0.5 から 1.0 までは v に対応する 80 次元の座標がプロットされている．時間がおおよそ 30000 以上のときは定常解の共変 Lyapunov ベクトルになっており, それ以前の時間では時間発展で定常解の共変 Lyapunov ベクトルに収束していくベクトルである．

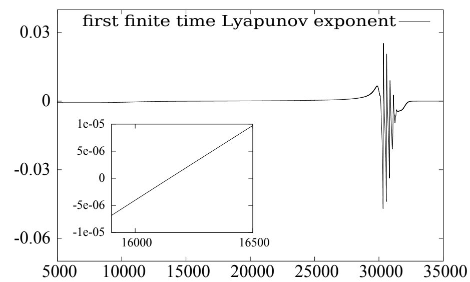

図 6　定常解における最大 Lyapunov 指数に対応する共変 Lyapunov ベクトルとその引き戻しから計算した有限時間 Lyapunov 指数．時間が 25000 以前のトランジェント軌道の v の山が 2 個の状態のとき, 有限時間 Lyapunov 指数はおおよそ 16145 で符号が負から正に変化する．

また, 図 5 から時間がおおよそ 16145 で有限時間 Lyapunov 指数の符号が負から正に変化していることがわかる．この時間は軌道が極限点に最も近づいた時間になっている．実際,

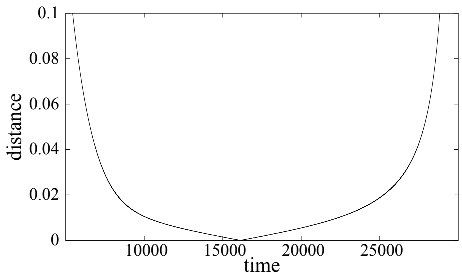

図 7　トランジェント軌道と v の山が 2 個のサドル・ノード分岐の極限点の定常解との距離．下の図は, 上の図の最小値付近の拡大図．トランジェント軌道は時間がおおよそ 16119 で極限点の定常解に最も近づいている．

図 7 はトランジェント軌道と v の山の数が 2 個のサドル・ノード分岐の極限点付近の定常解との距離の時間変化を表示している．時間がおおよそ 16119 のときにトランジェント軌道は, サドル・ノード分岐の極限点付近の定常解に最も近づくことがわかる．この時間は, 有限時間 Lyapunov 指数の符号が変わる時間とほぼ一致している．

この一致は, 有限時間 Lyapunov 指数は近似的には軌道の 2 階の時間微分に対応するので, サドル・ノード分岐が起こる 1 次元の常微分方程式で説明することができる．$\mu \in \mathbb{R}$ が分岐パラメータであるような次の 1 次元の常微分方程式

$$\dot{x} = x^2 - \mu,\ x(0) = 0,$$

を考える．軌道の 2 階の時間微分は $2x$ となるので, この場合の極限点である原点に近づくときに符号が変わることがわかる．

引き戻しによって求めたベクトルの向きの傾向を見るために, 1 番目から 5 番目までの固有ベクトルの引き戻しのベクトルのすべての組に対して内積を計算した．これらのベクトルの角度はほとんど平行なときとほとんど直交なときに分かれていたので, 内積の絶対値の和をとり,

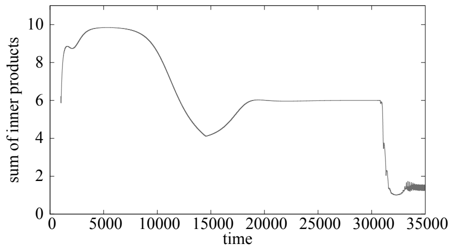

図 8　1 番目から 5 番目までの固有ベクトルの引き戻しのベクトルのすべての組に対する内積の絶対値の和．

傾向をグラフにした (図 8)．内積の絶対値の和は, 時間が 5000 から 10000 の間と 20000 から 30000 までの間はほぼ一定の値をとり, おおよそ 15000 で極小値をとる．v の山の数が 2 個である時間が 5000 から 30000 の間であっても, 引き戻しのベクトルのなす角度が変わっていることがわかる．

参考文献

[GPT+07] F. Ginelli, P. Poggi, A. Turchi, H. Chaté, R. Livi, and A. Politi, *Characterizing dynamics with covariant lyapunov vectors*, Phys. Rev. Lett. **99** (2007), no. 13, 130601.

[NU99] Yasumasa Nishiura and Daishin Ueyama, *A skeleton structure of self-replicating dynamics*, Physica D: Nonlinear Phenomena **130** (1999), no. 12, 73 – 104.

[Uey99] Daishin Ueyama, *Dynamics of self-replicating patterns in the one-dimensional Gray-Scott model*, Hokkaido Math. J. **28** (1999), no. 1, 175–210. MR 1673486 (99m:35110)