

力学系における分岐集合の数値計算手法

AndOh

2022 年 12 月 15 日

目次

第 I 部	はじめに	3
第 II 部	連続時間力学系	4
第 III 部	離散力学系	5
第 IV 部	局所的分岐	6
1	離散力学系	6
1.1	固定点条件	6
1.2	分岐条件	6
1.3	Neimark-Sacker 分岐の条件	8
2	平衡点	9
3	自律系の周期解	10
3.1	固定点条件	10
3.2	局所座標系	10
3.3	周期条件	11
3.4	固定点計算で用いる Jacobi 行列の導出	12
3.5	分岐点条件と Jacobi 行列	12
3.6	自律系周期解の接線分岐条件	12
4	非自律系の周期解	13
第 V 部	大域的分岐	14

第 VI 部	その他の分岐	15
5	ハイブリッド自律系の分岐	15
5.1	Poincaré 断面の配置	15
5.2	固定点計算で用いる Jacobi 行列の導出	17
5.3	分岐条件の導出	18
5.4	Grazing 分岐	18
第 VII 部	分岐計算プログラムの設計	21
6	分岐解析に用いる数値計算アルゴリズム	21
6.1	Newton 法	21
6.2	数値積分のイベント検知	22
7	実装例	22
8	SymPy による自動微分を用いた分岐計算	22
第 VIII 部	付録	23
9	付録：分岐条件の幾何学的意味	23
10	付録：連続時間力学系の変分方程式	23
11	付録：半安定周期解の固定点–“Multiple-Shooting”	24
12	付録：Bialternate 積と Neimark-Sacker 分岐・Hopf 分岐	25
12.1	Bialternate 積の定義とその微分	26

第 I 部

はじめに

本資料は、高次元離散力学系に対する汎用分岐計算プログラムを実装する際に作成した。特に Newton 法を用いた分岐計算における Jacobi 行列の 2 階変分方程式を重点的に解説している。2 階変分方程式は “3-dimensional matrix” と “Class-3 tensor” ととも言える非常に煩雑な式となるが、テンソルの概念とは異なった多次元行列を考えることにより通常の行列演算積を用いた簡潔な数式処理が行える。

また、付属資料として自律系の周期解の分岐解析手法も解説している。自律系の分岐解析の場合も、合成 Poincaré 写像の Jacobi 行列は離散力学系のものと同様になる。

付属する分岐計算プログラムは以降のアルゴリズムに沿って作成されている。自身で分岐計算プログラムを設計する際や、付属プログラムを使用する際に本資料が参考になるであろう。離散力学系そのものの情報については文献 [1] 及び [2] を参照していただきたい。

第Ⅱ部

連続時間力学系

第 III 部

離散力学系

第 IV 部

局所的分岐

1 離散力学系

離散力学系を次式で定義する:

$$\mathbf{x}_{k+1} = T(\mathbf{x}_k, \lambda), \quad T: \mathbf{R}^n \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^n, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \quad \lambda \in \mathbf{R}. \quad (1)$$

1.1 固定点条件

ℓ 周期固定点は次を満たす:

$$T^\ell(\mathbf{x}_0, \lambda) - \mathbf{x}_0 = \mathbf{0}. \quad (2)$$

ここで, $T^k = \overbrace{T \circ \cdots \circ T}^k$. これを Newton 法で \mathbf{x}_0 について解く.

Newton 法に必要な Jacobi 行列は T^ℓ が合成関数であることに注意すると, $\mathbf{x}_k = T^k(\mathbf{x}_0, \lambda)$ として,

$$\begin{aligned} \frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \prod_{k=\ell-1}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \\ &= \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-2}} \cdots \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}. \end{aligned} \quad (3)$$

ここで, $\prod_{k=\ell-1}^0$ は総積の表記法として適切ではないが, 表記の簡潔さと理解のしやすさのために, 以降これを $k = \ell-1, \ell-2, \dots, 1, 0$ となるイテレータとして用いる. (正しい例: $\prod_{k=0}^{\ell-1} \partial T / \partial \mathbf{x} |_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{(\ell-1)-k}}$.) また, プログラミングにおける“評価”の意味合いを込めて, 偏微分への代入記号に縦線を用いたものは数値を単に代入した行列であるとする. 明示的に引数を (...) で表記している場合は数学的な関数及び写像として扱う.

1.2 分岐条件

固定点の安定性は固定点まわりの線形化空間の写像に対する安定性で議論できる. よって, 特性定数が $\mu = 1, -1$ を満たす状態 (\mathbf{x}_0, λ) が分岐点である. $\mu = 1$ のとき接線分岐; Tangent Bifurcation, $\mu = -1$ のとき周期倍分岐; Period-doubling Bifurcation と呼ばれる. これより分岐条件は,

$$\begin{cases} T^\ell(\mathbf{x}_0, \lambda) - \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \\ \chi(\mathbf{x}_0, \lambda) = \det \left(\frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) - \mu I \right) = 0 \end{cases}. \quad (4)$$

Newton 法に必要な Jacobi 行列は,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) & \frac{\partial T^\ell}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) \\ \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) & \frac{\partial \chi}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

$\partial T^\ell / \partial \lambda$ は、合成関数及び多変数関数の微分を用いて、

$$\begin{aligned}\frac{\partial T^\ell}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \frac{\partial T^{\ell-1}}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \lambda} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}}, \\ \frac{\partial T^k}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{k-1}} \frac{\partial T^{k-1}}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \lambda} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{k-1}}, \\ \frac{\partial T^1}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial T}{\partial \lambda} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}.\end{aligned}\tag{6}$$

さて、ここで問題となるのが $\chi(\mathbf{x}_0, \lambda)$ の偏微分である。これらはそれぞれ $\partial T^\ell / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, \lambda)$ の \mathbf{x}, λ による偏微分が必要であるが、実際に計算してみるとテンソルのように奥行きのある立体行列が生成されることがわかる。実際にテンソル積は直積、外積、クロネッカー積といった複数の演算が存在するが、通常の行列積のような計算は(調べた限り)定義されていないし、これらのテンソル積で計算を行うと望んだ結果を得ることができない。そこで、この立体行列を“3-dimensional matrix”と考え、行列縮約表現と呼ぶ。コンセプトは文献 [3] 及び [4] を参照されたし。

まず、 $\partial T^\ell / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, \lambda)$ の \mathbf{x} による偏微分は式 (3) に注意して、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \prod_{k=\ell-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \prod_{k=\ell-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \\ &\quad + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-2}} \prod_{k=\ell-3}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \prod_{k=\ell-3}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \\ &\quad \vdots \\ &\quad + \prod_{k=\ell-1}^{j+1} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_j} \prod_{k=j-1}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \prod_{k=j-1}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \\ &\quad \vdots \\ &\quad + \prod_{k=\ell-1}^1 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}.\end{aligned}\tag{7}$$

注目すべきは立体行列 $\partial^2 T^\ell / \partial \mathbf{x}^2$ と通常の行列の積である。文献 [3] の方法を用いて行列縮約表現を行うと、 $n = 2, \ell = 2$ の場合、

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial^2 T^2}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}, \lambda) \quad \frac{\partial^2 T^2}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}}(\mathbf{x}, \lambda) \right) &= \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \right) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \right) \\ &= \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}^2 + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}^2 + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \right)\end{aligned}\tag{8}$$

として通常の行列積と同様に 2 階変分方程式の表現が可能になる。立体行列の式を上から眺めるような表現である [4]。

続いて、 $\partial T^\ell / \partial \lambda(\mathbf{x}_0, \lambda)$ の \mathbf{x} による偏微分は式 (6) に注意して、

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T^\ell}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \prod_{k=\ell-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \frac{\partial T^{\ell-1}}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{\partial T^{\ell-1}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x} \partial \lambda} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{\ell-1}} \prod_{k=\ell-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k}, \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T^j}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{j-1}} \prod_{k=j-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} \frac{\partial T^{j-1}}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{j-1}} \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{\partial T^{j-1}}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) + \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x} \partial \lambda} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_{j-1}} \prod_{k=j-2}^0 \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k}, \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T^1}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \lambda} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}.\end{aligned}\tag{9}$$

これは $\partial T^\ell / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, \lambda)$ の λ による微分によっても求まるが、式 (9) に比べて非常に煩雑になるため推奨しない。各式の第一項には立体行列 * 行列 * ベクトルが出現しているが、行列縮約表現を用いると、 $n = 2, \ell = 2$ の場合、

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x}^2} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \frac{\partial T^1}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) &= \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \right) \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \frac{\partial T^1}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) \\ &= \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad \frac{\partial T}{\partial \lambda} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad \frac{\partial^2 T}{\partial \mathbf{x} \partial \mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_1} \quad \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \quad \frac{\partial T}{\partial \lambda} \bigg|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} \right).\end{aligned}\tag{10}$$

よって各要素は $(2 \times 2) * (2 \times 2) * (2 \times 1) = (2 \times 1)$ のベクトルになる。結果、式 (10) は (2×2) 行列となり、望んだ結果が得られた。

次に、行列式 χ の微分を求める。行列 A の行列式を次のように定めると、

$$|A| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}\tag{11}$$

行列式の値は、

$$|A| = \sum_{\sigma \in S_n} \text{sgn}(\sigma) a_{\sigma(1)1} a_{\sigma(2)2} \cdots a_{\sigma(n)n}\tag{12}$$

で表される。ここで、 S_n は n 文字の置換の全体集合、 σ は置換、 $\text{sgn}(\sigma)$ は偶置換に対応して $1, -1$ を返す符号である。 $|A|$ の x_i に関する微分は、行列式の多重線形性を用いて、

$$\frac{\partial |A|}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^n \begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k-1} & \partial a_{1k} / \partial x_i & a_{1k+1} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2k-1} & \partial a_{2k} / \partial x_i & a_{2k+1} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nk-1} & \partial a_{nk} / \partial x_i & a_{nk+1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}\tag{13}$$

であり、予め $\partial^2 T^\ell / \partial \mathbf{x}^2(\mathbf{x}_0, \lambda)$, $\partial^2 T^\ell / \partial \mathbf{x} \partial \lambda(\mathbf{x}_0, \lambda)$ を求めておき、数値計算の際に $\partial T^\ell / \partial \mathbf{x}(\mathbf{x}_0, \lambda) - \mu I$ の各列要素を置換した行列式の総和を取れば良い。

1.3 Neimark-Sacker 分岐の条件

Neimark-Sacker 分岐は特性定数が複素平面の単位円を横切る際に発生する。接線分岐及び周期倍分岐の場合は $\mu = 1, -1$ であるが、Neimark-Sacker 分岐の場合は特性定数が $\mu = e^{j\theta}$ であるため、 θ も同時に求める必要がある。(Bialternate 積を用いると不要。付録:12 節参照。)

Neimark-Sacker 分岐条件は式 (4) の第二式の実虚部を分割すると,

$$\begin{cases} T^\ell(\mathbf{x}_0, \lambda) - \mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \\ \operatorname{Re}(\chi(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)) = 0 \\ \operatorname{Im}(\chi(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)) = 0 \end{cases} \quad (14)$$

であり, これを $(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)$ について解けば良い. Newton 法に必要な Jacobi 行列は,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) & \frac{\partial T^\ell}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda) & \frac{\partial T^\ell}{\partial \theta}(\mathbf{x}_0, \lambda) \\ \operatorname{Re}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \theta}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) \\ \operatorname{Im}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) & \operatorname{Im}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \lambda}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) & \operatorname{Im}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \theta}(\mathbf{x}_0, \lambda, \theta)\right) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

$\partial T^\ell / \partial \theta$ は T が θ に依存しないため $\mathbf{0}$ である. また,

$$\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\partial T^\ell}{\partial \mathbf{x}}(\mathbf{x}_0, \lambda) - e^{j\theta} I \right) = (\sin \theta - j \cos \theta) I. \quad (16)$$

ところで Jacobi 行列の 2, 3 行は偏微分と実虚部を取り出す演算 $\operatorname{Re}, \operatorname{Im}$ を入れ替えているが, これは複素関数 $f(z) \in \mathbf{C}, z = x + jy$ が $f(z) = u(x) + jv(y)$ として実関数 $u, v \in \mathbf{R}$ の和で表すことができるため自明.

以降の連続系の Neimark-Sacker 分岐においても同様に実虚部を分割した関数を Newton 法に与えると分岐計算が可能である. なお, 本 Neimark-Sacker 分岐計算アルゴリズムは接線分岐及び周期倍分岐曲線を含む為 ($\theta = 0, \pi$), それらの分岐集合も追跡可能である.

2 平衡点

非線形関数 $f: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ で記述される常微分方程式:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(t, \mathbf{x}, \lambda), \quad t \in \mathbf{R}, \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \lambda \in \mathbf{R}, \quad (17)$$

において, 次を満たす \mathbf{x}^* を平衡点という:

$$f(t, \mathbf{x}^*, \lambda) = \mathbf{0}. \quad (18)$$

平衡点の分岐は固有値 μ ^{*1} の実部が 0 の時発生する. これらはそれぞれ, $\operatorname{Im}(\mu) = 0$ の時接線分岐; Tangent Bifurcation, $\operatorname{Im}(\mu) \neq 0$ の時 Hopf 分岐; Hopf Bifurcation と呼ばれる.

平衡点の接線分岐条件は

$$\begin{cases} f(t, \mathbf{x}^*, \lambda) = \mathbf{0} \\ \operatorname{Re}(\chi(\mu)) = \operatorname{Re}\left(\det\left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} - \mu I\right)\right) = 0 \end{cases}. \quad (19)$$

これを (\mathbf{x}^*, λ) についてとけば良い. Newton 法に必要な Jacobi 行列は^{*2}

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} & \frac{\partial f}{\partial \lambda} \\ \operatorname{Re}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{x}}\Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*}\right) & \operatorname{Re}\left(\frac{\partial \chi}{\partial \lambda}\right) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

^{*1} 通常, 固有値は λ と表記される. 今回はパラメタに λ を使用しているため, μ を用いた. しかしながら本節以降解説する離散写像の固有値は特性定数; characteristic multiplier と呼ばれ, これには通常 μ が使用される.

^{*2} 偏微分と $\operatorname{Re}, \operatorname{Im}$ の置換は節 1.3 を参照.

3 自律系の周期解

自律系は $f: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{R}^n$ が時間 t に依存しない系:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}, \lambda), \quad t \in \mathbf{R}, \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \lambda \in \mathbf{R}. \quad (21)$$

このときの解が次を満たすとする:

$$\mathbf{x}(t) = \boldsymbol{\varphi}(t, \mathbf{x}_0), \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0. \quad (22)$$

さて、ここで解が $t \rightarrow \infty$ で周期的な解に近づいたとすると、その軌道は極限閉軌道 (Limit cycle; LC) と呼ばれる。パラメタ λ による系の振る舞いの変化を観察するためには、LC の安定性の変化を調べるのが重要であるが、LC は平衡点のような点の情報とは異なり、安定性を解軌道そのものから判定するのは困難である。

3.1 固定点条件

解が毎周期横切るような局所断面を考える。これを Poincaré 断面という。Poincaré 断面上での点の動きを観察すれば LC の安定性を議論することができる。

Poincaré 断面 Π 及び、 Π 上での写像 T を次式で定義する:

$$\Pi = \{\mathbf{x}_0 \in \mathbf{R}^n \mid q(\mathbf{x}_0) = 0\}, \quad (23)$$

$$T: \Pi \rightarrow \Pi, \quad \mathbf{x} \mapsto \boldsymbol{\varphi}(\tau, \mathbf{x}). \quad (24)$$

ここで、 τ は初期値 \mathbf{x}_0 から出発した解軌道が再び局所断面 Π に戻ってくるまでの時刻である。

また、次の条件を満たす点 \mathbf{x}_0 を固定点という。

$$T: \Pi \rightarrow \Pi, \quad \mathbf{x}_0 \mapsto \mathbf{x}_1 = T(\mathbf{x}_0) = \boldsymbol{\varphi}(\tau, \mathbf{x}_0) \quad (25)$$

すなわち固定点の条件は、

$$T(\mathbf{x}_0) - \mathbf{x} = \mathbf{0}. \quad (26)$$

3.2 局所座標系

局所断面 Π_0 上の点のうち、座標の一成分は常に固定されている (そうなるように配置したから)。例として、 $q(\mathbf{x}) = x_k - a = 0$ となるような局所断面を配置した場合、その座標は $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_k = a, \dots, x_n)$ となる。この場合、Poincaré 写像の特性定数の一つは常に $1 = e^{j0}$ であるため後の分岐条件に適合してしまい不都合である。これは、固定点の Poincaré 断面外への伸び縮みが無いことを示している。

そこで、 \mathbf{x}_0 の次元を 1 下げるような局所座標系 $\Sigma \subset \mathbf{R}^{n-1}$ への射影 (projection): h を考える:

$$h: \Pi \rightarrow \Sigma; \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n \mapsto \mathbf{u} \in \mathbf{R}^{n-1}. \quad (27)$$

逆写像 h^{-1} は $\Sigma \rightarrow \Pi$ とする埋め込み写像 (embed map) であり、

$$h^{-1}: \Sigma \rightarrow \Pi; \mathbf{u} \in \mathbf{R}^{n-1} \mapsto \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n. \quad (28)$$

局所座標平面 Σ 上での Poincaré 写像を $T_\ell = \mathbf{h}^{-1} \circ T \circ \mathbf{h} : \Sigma \rightarrow \Sigma, \mathbf{u} \mapsto \mathbf{u}$ と定義すると, Σ 上の固定点 \mathbf{u}_0 は次を満たす:

$$T_\ell(\mathbf{u}_0, \tau, \lambda) = \mathbf{h}^{-1} \circ T \circ \mathbf{h}(\mathbf{u}_0, \tau, \lambda) = \mathbf{u}_0. \quad (29)$$

よって固定点条件は,

$$T_\ell(\mathbf{u}_0, \tau, \lambda) - \mathbf{u} = \mathbf{0} \quad (30)$$

局所座標変換を施した Σ 上の Poincaré 写像を 1 周期軌道の場合について可視化したものを図.1 に示す.

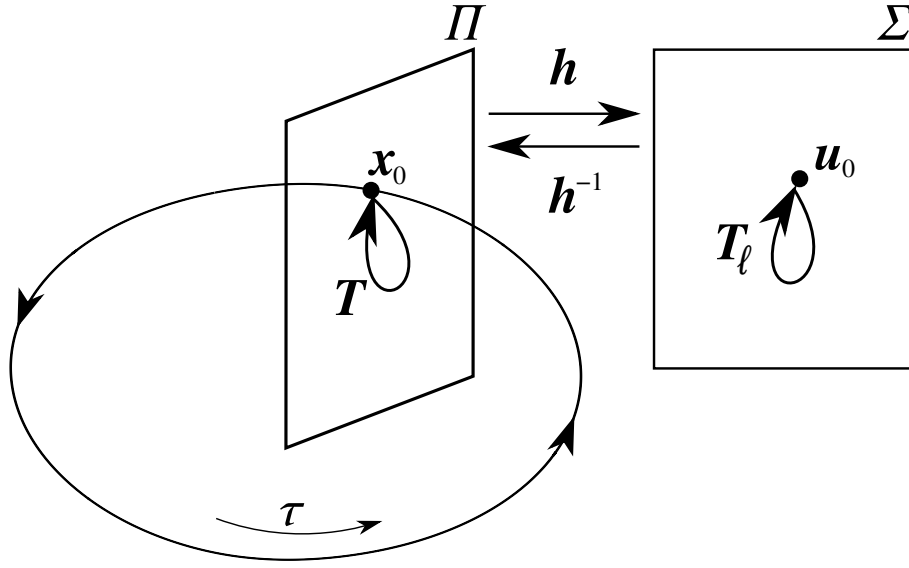


図1 Poincaré 断面の配置と局所座標変換のイメージ図

3.3 周期条件

局所断面 Π が,

$$\Pi = \{\mathbf{x} \in R^n \mid q(\mathbf{x}) = 0\} \quad (31)$$

となるように配置されているとしよう. 例えば $x_k = a$ となる位置に局所断面を配置した場合, $q(\mathbf{x}) = x_k - a$ である. ただし, 解軌道はパラメタに依って変化する. パラメタ変化によって軌道が局所断面から離れないよう, q の設定は予め慎重に決定する必要がある.

ところで, 自律系の周期解の周期 τ も, パラメタ λ に依って変化する. したがって, 固定点を計算するにあたって τ も同時に求める必要がある.

ある固定点 \mathbf{x}_0 は次を満たす.

$$q(T(\mathbf{x}_0)) = q(\varphi(\tau, \mathbf{x}_0)) = 0 \quad (32)$$

これを周期条件として固定点条件と連立して計算すれば良い.

3.4 固定点計算で用いる Jacobi 行列の導出

つぎの式を (\mathbf{u}_0, τ) について Newton 法で解く.

$$\begin{cases} T_\ell(\mathbf{u}_0) - \mathbf{u}_0 = \mathbf{0} \\ q(\varphi(\tau, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}_0))) = 0 \end{cases} \quad (33)$$

Jacobi 行列は,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} - I_{n-1} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \tau} \\ \frac{\partial q}{\partial \mathbf{u}_0} & \frac{\partial q}{\partial \tau} \end{pmatrix} \quad (34)$$

それぞれの成分について,

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_l}{\partial \mathbf{u}_0} &= \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \frac{\partial \mathbf{h}^{-1}}{\partial \mathbf{u}}, & \frac{\partial T_l}{\partial \tau} &= \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} f(\varphi(\tau, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}_0))), \\ \frac{\partial q}{\partial \mathbf{u}_0} &= \frac{\partial q}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \frac{\partial \mathbf{h}^{-1}}{\partial \mathbf{u}}, & \frac{\partial q}{\partial \tau} &= \frac{\partial q}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} = \frac{\partial q}{\partial \mathbf{x}} f(\varphi(\tau, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}_0))). \end{aligned} \quad (35)$$

$\partial \varphi / \partial x_0$ は初期値に関する第一変分方程式と呼ばれる. 変分方程式の導出については 10 節を参照されたい.

3.5 分岐点条件と Jacobi 行列

固定点の分岐条件は,

$$\chi_l(\mu) = \det \left(\frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} - \mu I_{n-1} \right) = 0. \quad (36)$$

よって次の連立方程式を, $(\mathbf{u}_0, \tau, \lambda)$ について解く:

$$\begin{cases} T_l(\mathbf{u}_0) - \mathbf{u}_0 = \mathbf{0} \\ q(\varphi(\tau, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}_0))) = 0 \\ \chi_l(\mu) = 0. \end{cases} \quad (37)$$

Jacobi 行列は,

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} - I_{n-1} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \tau} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial q}{\partial \mathbf{u}_0} & \frac{\partial q}{\partial \tau} & \frac{\partial q}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \chi}{\partial \mathbf{u}_0} & \frac{\partial \chi}{\partial \tau} & \frac{\partial \chi}{\partial \lambda} \end{pmatrix}. \quad (38)$$

3.6 自律系周期解の接線分岐条件

自律系の周期解計算はポアンカレ写像を考えるために, 特性定数 μ の一つは常に 1 を満たす. しかしながら, 接線分岐条件も $\mu = 1$ である. このとき特性定数は重複し, 式 36 をそのまま採用できない. そこで, 川上の方法 [2] を採用する (文献の局所分岐の章). 詳しい解説はここでは省くが, 結論から述べると採択する分岐条件は

$$\chi(\mu) = \det \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} - \mu I_n \right) = 0 \quad (39)$$

を μ について微分した

$$\frac{d\chi}{d\mu} = \underbrace{\begin{vmatrix} -1 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}}_{\textcircled{1}} + \underbrace{\begin{vmatrix} a_{11} & 0 & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & -1 & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & 0 & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}}_{\textcircled{2}} + \dots + \underbrace{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & -1 \end{vmatrix}}_{\textcircled{n}} = 0 \quad (40)$$

を分岐条件として採択する．ここで， $A = \{a_{ij}\} = \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0}$ である．行列式の微分に従い， i 行目を微分値で置換を行った行列式の総和である．Newton 法ではさらにこの微分が必要になる．すなわち

$$\frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial \mu} = \frac{\partial \textcircled{1}}{\partial x} + \frac{\partial \textcircled{2}}{\partial x} + \dots + \frac{\partial \textcircled{n}}{\partial x} \quad (41)$$

を計算しなければならない．例えば

$$\frac{\partial \textcircled{1}}{\partial x} = \begin{vmatrix} 0 & \frac{\partial a_{12}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial a_{1n}}{\partial x} \\ 0 & \frac{\partial a_{22}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial a_{2n}}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \frac{\partial a_{n2}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial a_{nn}}{\partial x} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial a_{1n}}{\partial x} \\ \frac{\partial a_{21}}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial a_{2n}}{\partial x} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial a_{n1}}{\partial x} & 0 & \dots & \frac{\partial a_{nn}}{\partial x} \end{vmatrix} + \dots + \begin{vmatrix} \frac{\partial a_{11}}{\partial x} & \frac{\partial a_{12}}{\partial x} & \dots & 0 \\ \frac{\partial a_{21}}{\partial x} & \frac{\partial a_{22}}{\partial x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial a_{n1}}{\partial x} & \frac{\partial a_{n2}}{\partial x} & \dots & 0 \end{vmatrix} \quad (42)$$

である．すなわち， \textcircled{i} は， i 番目の行列式の i 列目を 0 で置換した総和である．

4 非自律系の周期解

第 V 部

大域的分岐

第 VI 部

その他の分岐

5 ハイブリッド自律系の分岐

ハイブリッド自律系は次のように状態 \mathbf{x} によって系の振る舞いが変化する.

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}_k(\mathbf{x}, \lambda), \quad k = 0, 1, 2, \dots, m-1 \quad (43)$$

ハイブリッド系では \mathbf{f}_k 及び \mathbf{f}_{k+1} が切り替わる点は微分不可能であることに注意. (m 個の微分不可能な点が存在する.) しかし, 各 \mathbf{f}_k は微分可能であり, 微分不可能な点上に Poincaré 断面を配置することで分岐計算が可能である [5].

ここで通常の自律系はポアンカレ断面の配置がただ一つの場合であることを考えると, このハイブリッド自律系に対する分岐計算のアプローチは通常の自律系に対する分岐計算を内包する.

では, 改めて区間 k 内での解 \mathbf{x}_k を次のように定める.

$$\mathbf{x}_k(t) = \boldsymbol{\varphi}_k(t, \mathbf{x}_{k0}), \quad \mathbf{x}_k(0) = \mathbf{x}_{k0} \quad (44)$$

さらに, 式(43)の解軌道を次のようにおく.

$$\mathbf{x}_{k+1}(t) = \boldsymbol{\varphi}_k(t, \mathbf{x}_k) \quad (45)$$

ここで,

$$\mathbf{x}_{k+1} = \boldsymbol{\varphi}_{k+1}(0, \mathbf{x}_{k+1}) = \boldsymbol{\varphi}_k(\tau_k, \mathbf{x}_k). \quad (46)$$

5.1 Poincaré 断面の配置

系の m 個の微分不可能な点上に Poincaré 断面を配置する.

$$\begin{aligned} \Pi_0 &= \{\mathbf{x}_0 \in \mathbf{R}^n \mid q_0(\mathbf{x}_0) = 0\} \\ \Pi_1 &= \{\mathbf{x}_1 \in \mathbf{R}^n \mid q_1(\mathbf{x}_1) = 0\} \\ &\dots \\ \Pi_{m-1} &= \{\mathbf{x}_{m-1} \in \mathbf{R}^n \mid q_{m-1}(\mathbf{x}_{m-1}) = 0\} \end{aligned} \quad (47)$$

各断面間の写像 $T_k : \Pi_k \rightarrow \Pi_{k+1}$ を次のように定める.

$$\begin{aligned} T_0 &= \Pi_0 \rightarrow \Pi_1 \\ \mathbf{x}_0 &\mapsto \mathbf{x}_1 = \boldsymbol{\varphi}_0(\tau_0, \mathbf{x}_0) \\ T_1 &= \Pi_1 \rightarrow \Pi_2 \\ \mathbf{x}_1 &\mapsto \mathbf{x}_2 = \boldsymbol{\varphi}_1(\tau_1, \mathbf{x}_1) \\ &\dots \\ T_{m-1} &= \Pi_{m-1} \rightarrow \Pi_0 \\ \mathbf{x}_{m-1} &\mapsto \mathbf{x}_0 = \boldsymbol{\varphi}_{m-1}(\tau_{m-1}, \mathbf{x}_{m-1}). \end{aligned} \quad (48)$$

ここで, τ_k は各断面間を軌道が到達するのにかかる時間である. Π_0 上でのポアンカレ写像 $T = \Pi_0 \rightarrow \Pi_0$ は,

$$T = T_{m-1} \circ T_{m-2} \circ \dots \circ T_1 \circ T_0. \quad (49)$$

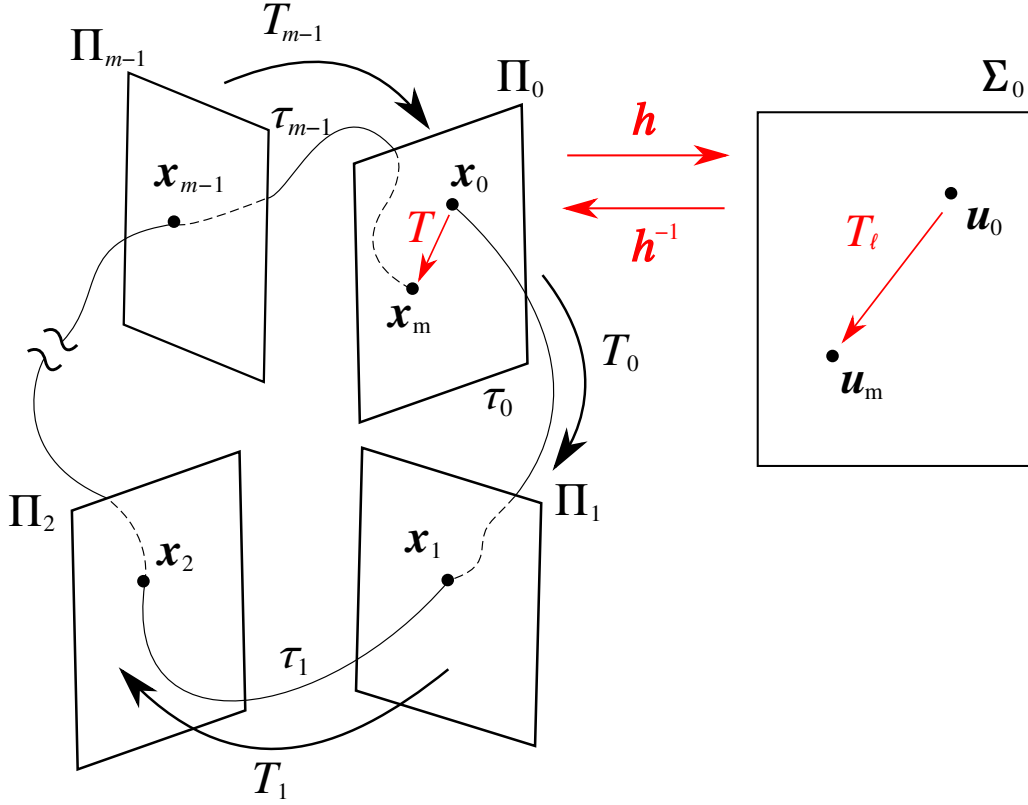


図2 Poincaré 断面の配置と局所座標変換のイメージ図

よって Jacobian は,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}_0} \right|_{t=\tau} = \prod_{k=m-1}^0 \left. \frac{\partial T_k}{\partial \mathbf{x}_k} \right|_{t=\tau_k}, \quad \tau = \sum_{k=0}^{m-1} \tau_k. \quad (50)$$

第2章と同様に, T_ℓ は,

$$\begin{aligned} T_\ell : \Sigma_0 &\rightarrow \Sigma_0 \\ \mathbf{u} &\mapsto \mathbf{h} \circ T \circ \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}) = \mathbf{h} \circ T_{m-1} \circ \cdots \circ T_0 \circ \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}) \end{aligned} \quad (51)$$

詳しく書くと,

$$T_\ell(\mathbf{u}) = \mathbf{h}(\varphi_{m-1}(\tau_{m-1}, \varphi_{m-2}(\tau_{m-2}, \dots, \varphi_1(\tau_1, \varphi(\tau_0, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u})))))) \dots \quad (52)$$

固定点条件は,

$$\mathbf{u}_0 - T_\ell(\mathbf{u}_0) = \mathbf{0} \quad (53)$$

周期条件は,

$$\begin{aligned} q_0(\varphi_{m-1}(\tau_{m-1}, \mathbf{x}_{m-1})) &= 0 \\ q_1(\varphi_0(\tau_0, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}))) &= 0 \\ &\vdots \\ q_{m-1}(\varphi_{m-2}(\tau_{m-2}, \mathbf{x}_{m-2})) &= 0. \end{aligned} \quad (54)$$

ここで, $\mathbf{x}_k = \varphi_{k-1}(\tau_{k-1}, \mathbf{x}_{k-1})$ となるので, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u})$ から連鎖的に求めることが可能である.

5.2 固定点計算で用いる Jacobi 行列の導出

解くべき条件は,

$$\begin{cases} \mathbf{u} - T_\ell(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \\ q_0(\boldsymbol{\varphi}_{m-1}(\tau_{m-1}, \mathbf{x}_{m-1})) = 0 \\ q_1(\boldsymbol{\varphi}_0(\tau_0, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}))) = 0 \\ \vdots \\ q_{m-1}(\boldsymbol{\varphi}_{m-2}(\tau_{m-2}, \mathbf{x}_{m-2})) = 0. \end{cases} \quad (55)$$

Jacobi 行列は,

$$\begin{pmatrix} I_{n-1} - \frac{\partial T_l}{\partial \mathbf{u}_0} & \frac{\partial T_l}{\partial \boldsymbol{\tau}} \\ \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\tau}} \end{pmatrix} \quad (56)$$

ここで,

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \mathbf{h}^{-1}}{\partial \mathbf{u}}. \quad (57)$$

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \left(\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \right) \begin{pmatrix} \prod_{k=m-1}^1 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \cdots & \prod_{k=m-1}^{m-2} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & f_1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & & f_{m-1} \end{pmatrix} \quad (58)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{u}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q_0}{\partial \mathbf{x}} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & & \frac{\partial q_{m-1}}{\partial \mathbf{x}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \prod_{k=m-1}^0 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} \\ \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_0}{\partial \mathbf{x}_0} \\ \vdots \\ \prod_{k=m-2}^0 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} \end{pmatrix} \left(\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \right) \quad (59)$$

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\tau}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q_0}{\partial \mathbf{x}} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & & \frac{\partial q_{m-1}}{\partial \mathbf{x}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \prod_{k=m-1}^1 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \prod_{k=m-1}^2 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \cdots & \prod_{k=m-1}^{m-2} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{m-1}}{\partial \mathbf{x}_{m-1}} & I \\ I & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_1}{\partial \mathbf{x}_1} & I & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_2}{\partial \mathbf{x}_2} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_1}{\partial \mathbf{x}_1} & \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_2}{\partial \mathbf{x}_2} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \prod_{k=m-2}^1 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \prod_{k=m-2}^2 \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & \cdots & \prod_{k=m-2}^{m-2} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_k}{\partial \mathbf{x}_k} & I & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_0 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & f_1 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \mathbf{0} & \cdots & & f_{m-1} \end{pmatrix} \quad (60)$$

プログラムに書き起こす場合は、それぞれヤコビ行列の要素をブロック行列の積とみなせば非常にシンプルに記述ができる。Python の場合は `numpy.matmul` がこの種の行列積に対応している。 `numpy.dot` は以降の分岐条件の微分でテンソルを扱う際に不都合なので推奨しない。なお、@演算子は `numpy.matmul` である。

5.3 分岐条件の導出

解くべき条件は、

$$\begin{cases} \mathbf{u} - T_\ell(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \\ q_0(\boldsymbol{\varphi}_{m-1}(\tau_{m-1}, \mathbf{x}_{m-1})) = 0 \\ q_1(\boldsymbol{\varphi}_0(\tau_0, \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}))) = 0 \\ \vdots \\ q_{m-1}(\boldsymbol{\varphi}_{m-2}(\tau_{m-2}, \mathbf{x}_{m-2})) = 0 \\ \chi(\mu) = \det\left(\frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}} - \mu I\right) = 0. \end{cases} \quad (61)$$

Jacobi 行列は、

$$\begin{pmatrix} I_{n-1} - \frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \boldsymbol{\tau}} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \boldsymbol{\tau}} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \chi(\mu)}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial \chi(\mu)}{\partial \boldsymbol{\tau}} & \frac{\partial \chi(\mu)}{\partial \lambda} \end{pmatrix} \quad (62)$$

ここで、

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial \lambda} = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{m-1}}{\partial \lambda}. \quad (63)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial \lambda} = \frac{\partial q_i}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_{i-1}}{\partial \lambda} + \frac{\partial q_i}{\partial \lambda} \quad (64)$$

5.4 Grazing 分岐

A bifurcation phenomenon unique to hybrid systems is grazing bifurcation, which is caused by the vector field not being smooth. When the stability of a periodic orbit changes continuously across the interval of each vector field, the bifurcation phenomenon is called a border-collision bifurcation. In this case, the bifurcation analysis method described above can be applied using the composite function of the Poincaré map. However, when a periodic orbit suddenly becomes unstable and chaotic when it touches a discontinuity point, the bifurcation is called a grazing bifurcation[6]. Consider a periodic solution tangent to a non-differentiable section. At that point, there is a point where the normal vector of the cross section is the zero vector, and the inner product of that point with the vector field of the system is zero:

$$\begin{cases} \left. \frac{dq_{k+1}}{dt} = \frac{\partial q_{k+1}}{\partial \mathbf{x}} \frac{d\boldsymbol{\varphi}_k}{dt} \right|_{t=\tau_{th}} = 0 \\ q_{k+1}(\boldsymbol{\varphi}_k(\tau_{th}, \mathbf{x}_k)) = 0, \end{cases} \quad (65)$$

where, τ_{th} is the time to reach to the section q_{k+1} from \mathbf{x}_k . We denote the grazing bifurcation as Z. Figure. 3 shows the orbit undergoing a grazing bifurcation.

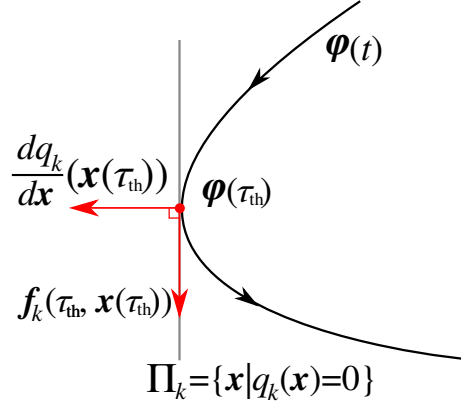


图 3 The orbit undergoing grazing a bifurcation.

This bifurcation is not related with the characteristic multiplier, so numerical calculations can be performed without using local coordinate. In other words, we can obtain the bifurcation point by solving Eqs. (??), (??) and (65) simultaneously for $(\mathbf{x}, \tau, \lambda, \tau_{th})$.

In actual numerical calculations, the bifurcation condition can be simplified by designating the Poincaré section tangent to the onset of the bifurcation as Π_1 and the immediately preceding section as Π_0 . Therefore, in this study, let k be zero in Eq. (65).

To find the Grazing bifurcation point, solve the simultaneous equations of equations Eqs. (53), (??), and (65) for $(\mathbf{u}, \tau, \tau_{th}, \lambda)$. Therefore, the Jacobi matrix required for Newton's method is

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial T_\ell}{\partial \mathbf{u}_0} - I_{n-1} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \tau} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \tau_{th}} & \frac{\partial T_\ell}{\partial \lambda} \\ \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial q_1} \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial q_1} & \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial q_1} \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \frac{dq_1}{dt} & \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{dq_1}{dt} & \frac{\partial}{\partial \tau_{th}} \frac{dq_1}{dt} & \frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{dq_1}{dt} \end{pmatrix}. \quad (66)$$

where,

$$\frac{\partial T_\ell}{\partial \tau_{th}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial \tau_{th}} = \mathbf{0}, \quad (67)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial \tau} = \mathbf{0}^\top, \quad \frac{\partial}{\partial \tau} \frac{dq_1}{dt} = \mathbf{0}^\top. \quad (68)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{u}} = \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_0}{\partial \mathbf{x}_0} \Big|_{t=\tau_{th}} \frac{\partial \mathbf{h}^{-1}}{\partial \mathbf{u}}, \quad (69)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial \tau_{th}} = \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}_0, \quad (70)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \frac{dq_1}{dt} = \frac{\partial^2 q_1}{\partial \mathbf{x}^2} \frac{\partial \boldsymbol{\varphi}_0}{\partial \mathbf{x}_0} \Big|_{t=\tau_{th}} \frac{\partial \mathbf{h}^{-1}}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{f}_0 + \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{f}_0}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}_0, \quad (71)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau_{th}} \frac{dq_1}{dt} = \left(\frac{\partial^2 q_1}{\partial \mathbf{x}^2} \mathbf{f}_0 \right) \mathbf{f}_0 + \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{f}_0}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}_0, \quad (72)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \frac{dq_1}{dt} = \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x} \partial \lambda} \mathbf{f}_0 + \frac{\partial q_1}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{f}_0}{\partial \lambda}. \quad (73)$$

To simplify the equation, we put $f_0(\varphi_0(\tau_{\text{th}}, \boldsymbol{h}^{-1}(\boldsymbol{u}), \lambda), \lambda)$ as f_0 .

第 VII 部

分岐計算プログラムの設計

本章では以上の分岐解析手法を用いて実際にプログラムを作成する際の指針を示す。以下の計算機環境を用いることとする。

- Shell : Unix shell (zsh, bash 等)
- Language : C++
- library : [Eigen-3.4-rc1](#), [nlohmann-3.10.1](#)

分岐計算は大規模な数値積分が必要なため、パフォーマンスを鑑みて C++ を使用する。Eigen は線形代数ライブラリであり、ヘッダインクルートのみで利用できる。また、nlohmann は json を C++ 上で扱うためのライブラリであり、これも Eigen と同じくヘッダインクルードのみの利用が可能である。Python 環境を用いる場合は、線形代数演算:[NumPy](#)、積分器:[SciPy](#)、自動微分 (必要な場合):[SymPy](#) などを用いると良い。自動微分は計算が非常に低速となるため、複雑な系の計算以外は前節までに解説した分岐解析手法の実装を推奨。

6 分岐解析に用いる数値計算アルゴリズム

6.1 Newton 法

Newton 法は代数方程式の解を反復的に求めるアルゴリズムである。対象とする方程式に対する条件は求根領域の微分可能性のみであり、収束の速度も 2 次収束と非常に高速に計算が可能である。なお、Newton 法は他のリッチな求根アルゴリズムと比べ収束領域が非常に狭い。しかしながら、これは計算が成功した際の結果は Python の `scipy.root` 関数などと比べると信頼性が高いという利点ともなり得る。`scipy.root` 関数は Jacobi 行列を与えずとも収束性が非常に高いメソッドが多いものの、得た結果が本当にほしいものかどうかを確かめる作業が (Newton 法の場合も行うべきであるが) 必要である。

次の非線形代数方程式を考える：

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}. \quad (74)$$

\mathbf{x} の第 k 近似解を \mathbf{x}_k とすると、 \mathbf{x}_k まわりの Taylor 展開は、

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_k) + \left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) + \cdots \quad (75)$$

非線形項を無視し、 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ より、

$$f(\mathbf{x}_k) + \left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_k) = \mathbf{0}. \quad (76)$$

解 \mathbf{x} を第 $k+1$ 近似解と置き換えて、次の形に整理できる：

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_k} (\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k) = -f(\mathbf{x}_k) \quad (77)$$

これは線形方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ の形をしているため、 $(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k)$ について Gauss の消去法等を用いて解けば第 $k+1$ 次近似解と第 k 次近似解の差分がわかる。

6.2 数値積分のイベント検知

Poincaré 断面近傍の状態 \mathbf{x} から時刻 h 後に Poincaré 断面を横断したとする．このとき時刻 h は次を満たす． $q(\varphi(h, \mathbf{x})) = 0$ これを h について解けばポアンカレ断面に接する際の精度良い時刻が求まる．Newton 法を用いて，

$$h_{k+1} = h_k - \frac{q(\varphi(h, \mathbf{x}))}{\frac{\partial q}{\partial \mathbf{x}} f(h, \mathbf{x})}. \quad (78)$$

なお，分母は 0 になるのは $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) = \mathbf{0}$ ，すなわち平衡点の場合のみであるが，イベント検知は周期解に対して行うためゼロ除算は発生しない．二分法を用いてもよいが，1 次収束のためパフォーマンスが悪い．

7 実装例

8 SymPy による自動微分を用いた分岐計算

第 VIII 部

付録

9 付録：分岐条件の幾何学的意味

10 付録：連続時間力学系の変分方程式

本資料の行列縮約表現を用いることで、連続力学系の変分方程式も簡潔に記述することができる。系が次の式で表現されるとする：

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x, \lambda), \quad f: \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}^n, \quad t \in \mathbf{R}, \quad x \in \mathbf{R}^n, \quad \lambda \in \mathbf{R}. \quad (79)$$

初期値 x_0 から出発して τ 時刻後に x_0 に帰還する解を φ とし、次のように定義する：

$$\begin{aligned} x(t) &= \varphi(t, x_0, \lambda), \\ x(t + \tau) &= \varphi(t + \tau, x_0, \lambda) = x(t), \\ x(0) &= x_0. \end{aligned} \quad (80)$$

式 (79), (80) より、

$$\frac{d\varphi}{dt}(t, x_0, \lambda) = f(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda). \quad (81)$$

式 (81) を x_0 で偏微分し、

$$\frac{\partial}{\partial x_0} \frac{d\varphi}{dt}(t, x_0, \lambda) = \frac{\partial}{\partial x_0} f(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda). \quad (82)$$

式 (79) が十分なめらかであると仮定すると、偏微分の順序は交換可能である。合成関数の微分を適用して、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} = \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial x_0}. \quad (83)$$

同じく式 (81) を λ で偏微分して整理すると (合成関数・多変数関数の微分)、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} = \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} + \frac{\partial f}{\partial \lambda}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda). \quad (84)$$

これで初期値及びパラメタに関する第一変分方程式が求まった。

続いて、式 (83) を x_0 で偏微分すると、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0^2} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} + \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0^2}. \quad (85)$$

行列縮約表現を用いると、 $n = 2$ のとき、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d}{dt} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial x_0} \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial y_0} \right) &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \right) \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \\ &\quad + \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial x_0} \quad \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial y_0} \right) \\ &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial x_0} \right. \\ &\quad \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_0} \right)^2 + \frac{\partial f}{\partial x}(t, \varphi(t, x_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_0 \partial y_0} \right) \end{aligned} \quad (86)$$

よって $(2 \times 2 \times 2)$ 行列が得られた。また、式 (84) を \mathbf{x}_0 で偏微分すると、

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \lambda \partial \mathbf{x}_0} = \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x}^2}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \lambda \partial \mathbf{x}_0} + \frac{\partial^2 f}{\partial \lambda \partial \mathbf{x}}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0}. \quad (87)$$

注意すべきは第一項で、 $n = 2$ のとき、

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x}^2}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x} \partial x}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x} \partial y}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \right) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} \\ &= \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x} \partial x}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial \mathbf{x} \partial y}(t, \varphi(t, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} \frac{\partial \varphi}{\partial \lambda} \right). \end{aligned} \quad (88)$$

よって (2×2) 行列が得られた。式 (9) と同じく、式 (83) の λ による微分は非常に複雑であるため推奨しない。

これらの変分方程式を式 (79) と連立し、時刻 0 から τ まで同時に数値積分すれば解の初期値及びパラメタによる偏微分が得られる。

周期 τ による第二変分方程式は初期値に関する第一変分方程式 (81) に注意して、

$$\frac{d}{d\tau} \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}(\tau, \varphi(\tau, \mathbf{x}_0, \lambda), \lambda) \frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}_0}. \quad (89)$$

すなわち、 τ による変分方程式は数値積分に組み込む必要はなく、先に求めておいた $\partial f / \partial \mathbf{x}$ と $\partial \varphi / \partial \mathbf{x}_0$ の行列積で簡単に求まる。

11 付録：半安定周期解の固定点–“Multiple-Shooting”

これを Newton 法で解けば固定点情報を入手できる。しかしながら、写像 T は数値積分を用いるため、解軌道が半安定な場合は積分区間が長くなるほど周期解から遠ざかるため、数値計算が困難な場合がある。(完全不安定な場合は逆時間積分を行えばよい)。そこで、Poincaré 断面を複数配置して積分区間を短くし、各 Poincaré 断面上の固定点を解軌道に縛り付ける方法を “Multiple-Shooting method” [7] と呼ぶ。

改めて各 Poincaré 断面の区間 $k = 0, 1, \dots, m-1$ の解を次のように定義する：

$$\mathbf{x}_k(t) = \varphi_k(t, \mathbf{x}_k), \quad \mathbf{x}_k(0) = \mathbf{x}_k. \quad (90)$$

式 (21) の解は次を満たす：

$$\mathbf{x}_{k+1}(t) = \varphi_k(t, \mathbf{x}_k), \quad (91)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \varphi_{k+1}(0, \mathbf{x}_{k+1}) = \varphi_k(\tau_k, \mathbf{x}_k). \quad (92)$$

ここで、Poincaré 断面を複数配置する：

$$\begin{aligned} \Pi_0 &= \{\mathbf{x}_0 \in \mathbf{R}^n \mid q_0(\mathbf{x}_0) = 0\} \\ \Pi_1 &= \{\mathbf{x}_1 \in \mathbf{R}^n \mid q_1(\mathbf{x}_1) = 0\} \\ &\dots \\ \Pi_{m-1} &= \{\mathbf{x}_{m-1} \in \mathbf{R}^n \mid q_{m-1}(\mathbf{x}_{m-1}) = 0\} \end{aligned} \quad (93)$$

各断面間の写像 $T_k : \Pi_k \rightarrow \Pi_{k+1}$ は,

$$\begin{aligned}
T_0 &= \Pi_0 \rightarrow \Pi_1 \\
\mathbf{x}_0 &\mapsto \mathbf{x}_1 = \boldsymbol{\varphi}_0(\tau_0, \mathbf{x}_0) \\
T_1 &= \Pi_1 \rightarrow \Pi_2 \\
\mathbf{x}_1 &\mapsto \mathbf{x}_2 = \boldsymbol{\varphi}_1(\tau_1, \mathbf{x}_1) \\
&\dots \\
T_{m-1} &= \Pi_{m-1} \rightarrow \Pi_0 \\
\mathbf{x}_{m-1} &\mapsto \mathbf{x}_0 = \boldsymbol{\varphi}_{m-1}(\tau_{m-1}, \mathbf{x}_{m-1}).
\end{aligned} \tag{94}$$

ここで, τ_k は解が断面 Π_k から Π_{k+1} に到達するのにかかる時刻である. Π_0 上でのポアンカレ写像 $T : \Pi_0 \rightarrow \Pi_0$ は, $T = T_{m-1} \circ T_{m-2} \circ \dots \circ T_1 \circ T_0$. よって,

$$T(\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\tau}, \lambda) - \mathbf{x}_0 = \mathbf{0}. \tag{95}$$

が固定点条件となる. ここで, $\boldsymbol{\tau} = (\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_{m-1})$.

すなわち, “Multiple-Shooting method” における周期条件は,

$$\begin{aligned}
q_0(T_{m-1}(\mathbf{x}_{m-1}, \tau_{m-1}, \lambda)) &= 0 \\
q_1(T_0(\mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u}_0), \tau_0, \lambda)) &= 0 \\
&\vdots \\
q_{m-1}(T_{m-2}(\mathbf{x}_{m-2}, \tau_{m-2}, \lambda)) &= 0.
\end{aligned} \tag{96}$$

ここで, $\mathbf{x}_k = \boldsymbol{\varphi}_{k-1}(\tau_{k-1}, \mathbf{x}_{k-1})$ となるので, $\mathbf{x}_0 = \mathbf{h}^{-1}(\mathbf{u})$ から連鎖的に求めることが可能である.

12 付録：Bialternate 積と Neimark-Sacker 分岐・Hopf 分岐

固定点の Neimark-Sacker 分岐点及び平衡点の Hopf 分岐点では, それぞれの点が複素共役な固有値・特性定数を持つ. 1 節では単純に線形化空間のヤコビアンを計算したが, Newton 法の目的関数の内, 分岐条件が複素数を持つために実部虚部を分割する必要がある. この操作は複素数を扱うことのできる計算機言語の場合は簡潔に記述ができるものの, 複素数を扱えない言語では煩雑な操作 [8] が必要である. また, 複素数を扱う言語であっても目的関数に特性定数の偏角 θ を与える必要があり, 目的関数の導関数の計算が面倒であったり, パフォーマンスが低下したりする.

本節では “Bialternate product” [7] を用いることで目的関数を実空間のみで計算する手法を紹介する. 結論から述べると, $A, B \in \mathbf{R}^{n \times n}$ に対する Bialternate 積 $A \odot B$ は次を満たす.

1. $A \odot A$ は固有値 $\mu_i \mu_j$ を持つ
2. $2A \odot I_n$ は固有値 $\mu_i + \mu_j$ を持つ

Neimark-Sacker 分岐では複素平面の単位円上に共役複素固有値が存在するため, $\mu_i \mu_j = 1$ を満たすから

$$\det(A \odot A - I_m) = 0, \tag{97}$$

を分岐条件として採択可能. ただし, $m = \frac{1}{2}n(n-1)$; 1 から $n-1$ までの等差数列の総和. 同じく Hopf 分岐は実部が 0 の共役複素数について, $\mu_i + \mu_j = 0$ となるため,

$$\det(2A \odot I_n) = 0. \tag{98}$$

が分岐条件となる。素晴らしいことに、式 (97), (98) は Bialternate 積の固有値の性質により、虚部が代数的に削除されている！ところで、 $2A \odot I_n$ の固有値の和特性は特に便利のため、“Biproduct” という特別な呼び方が存在する。

12.1 Bialternate 積の定義とその微分

Bialternate 積は $\mathbf{R}^n \mapsto \mathbf{R}^m$ の線形変換であり、各要素は次で計算される^{*1}:

$$(A \odot B)_{(p,q),(r,s)} = \frac{1}{2} \left\{ \begin{vmatrix} a_{pr} & a_{ps} \\ b_{qr} & b_{qs} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{pr} & b_{ps} \\ a_{qr} & a_{qs} \end{vmatrix} \right\}. \quad (99)$$

$n \times n$ 行列のインデックスを $0, 1, \dots, n-1$ と表すとする、各要素のインデックスは行方向が (p, q) ($p = 1, 2, \dots, n-1; q = 0, 1, \dots, p-2$), 列方向が (r, s) ($r = 1, 2, \dots, n-1; s = 0, 1, \dots, r-2$) で与えられる。例えば $n = 4$ のとき、ラベリングは

$$\begin{array}{cccccc} (1,0), (1,0) & (1,0), (2,0) & (1,0), (2,1) & (1,0), (3,0) & (1,0), (3,1) & (1,0), (3,2) \\ (2,0), (1,0) & (2,0), (2,0) & (2,0), (2,1) & (2,0), (3,0) & (2,0), (3,1) & (2,0), (3,2) \\ (2,1), (1,0) & (2,1), (2,0) & (2,1), (2,1) & (2,1), (3,0) & (2,1), (3,1) & (2,1), (3,2) \\ (3,0), (1,0) & (3,0), (2,0) & (3,0), (2,1) & (3,0), (3,0) & (3,0), (3,1) & (3,0), (3,2) \\ (3,1), (1,0) & (3,1), (2,0) & (3,1), (2,1) & (3,1), (3,0) & (3,1), (3,1) & (3,1), (3,2) \\ (3,2), (1,0) & (3,2), (2,0) & (3,2), (2,1) & (3,2), (3,0) & (3,2), (3,1) & (3,2), (3,2) \end{array}$$

となり、 $3 + 2 + 1 = 6$ 正方行列が生成される。

次に、Neimark-Sacker 分岐で用いる $A \odot A$ の各成分は明らかに、

$$(A \odot A)_{(p,q),(r,s)} = \begin{vmatrix} a_{pr} & a_{ps} \\ a_{qr} & a_{qs} \end{vmatrix}. \quad (100)$$

よって各成分の導関数は

$$\frac{\partial}{\partial x} (A \odot A)_{(p,q),(r,s)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial a_{pr}}{\partial x} & a_{ps} \\ \frac{\partial a_{qr}}{\partial x} & a_{qs} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{pr} & \frac{\partial a_{ps}}{\partial x} \\ a_{qr} & \frac{\partial a_{qs}}{\partial x} \end{vmatrix}. \quad (101)$$

ところで、 $n = 2$ の時に限れば、 $m = 1$ であるので、

$$A \odot A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{10} \\ a_{01} & a_{00} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_{00} & a_{01} \\ a_{10} & a_{11} \end{vmatrix} = \det(A) \quad (102)$$

となり、分岐条件は $\det(A \odot A - 1)$ であるので、 A を $\frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}_0}$ で置き換えてみると、

$$\det \left(\frac{\partial T}{\partial \mathbf{x}_0} \right) - 1 = 0. \quad (103)$$

すなわち、手計算で $e^{j\theta}$ の θ を削除した結果と同じ式が得られる。

続いて、Hopf 分岐条件の $2A \odot I_n$ の各成分は、

$$(2A \odot I_n)_{(p,q),(r,s)} = \begin{vmatrix} a_{pr} & a_{ps} \\ \delta_{qr} & \delta_{qs} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} \delta_{pr} & \delta_{ps} \\ a_{qr} & a_{qs} \end{vmatrix} \quad (104)$$

^{*1} Bialternate 積の定義は簡潔に説明し、証明は行わない。詳細な定義は文献 [7] の第 10 章とその付録 10.B, または文献 [9] を参照せよ。

ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。これを展開すると、

$$(2A \odot I_n)_{(p,q),(r,s)} = \begin{cases} -a_{ps} & \text{if } r = q, \\ a_{pr} & \text{if } r \neq p \text{ and } s = q, \\ a_{pp} + a_{qq} & \text{if } r = p \text{ and } s = q, \\ a_{qs} & \text{if } r = p \text{ and } s \neq q, \\ -a_{qr} & \text{if } s = p, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (105)$$

であり、導関数もこれをそのまま微分すれば良い。

Listing 1 NS 条件の微分の例

```

1  /*****
2  A : 行列 A
3  dA : 行列の微分 A
4  xdim : の次元 An
5  bialt_dim : Bialternate product で生成される次元 m
6  *****/
7  Eigen::MatrixXd bialt_prod_square_derivative(
8      const Eigen::MatrixXd &A,
9      const Eigen::MatrixXd &dA,
10     int xdim,
11     int bialt_dim) {
12     Eigen::MatrixXd ret(bialt_dim, bialt_dim);
13     int row = 0;
14     int col = 0;
15     Eigen::Matrix2d temp;
16     Eigen::Matrix2d dtemp;
17     for (int p = 1; p < xdim; p++) {
18         for (int q = 0; q < p; q++) {
19             for (int r = 1; r < xdim; r++) {
20                 for (int s = 0; s < r; s++) {
21                     temp(0, 0) = A(p, r);
22                     temp(0, 1) = A(p, s);
23                     temp(1, 0) = A(q, r);
24                     temp(1, 1) = A(q, s);
25                     dtemp(0, 0) = dA(p, r);
26                     dtemp(0, 1) = dA(p, s);
27                     dtemp(1, 0) = dA(q, r);
28                     dtemp(1, 1) = dA(q, s);
29                     ret(row, col++) = det_derivative(temp, dtemp, 2);
30                 }
31             }
32             col = 0;
33             row++;
34         }
35     }
36     return ret;
37 }

```

参考文献

- [1] T. U. Hiroshi Kawakami, *C によるカオス CG*. サイエンス社, 1995.
- [2] H. Kawakami, *非線形現象入門*. 徳島大学, 1995.
- [3] A. Solo, “Multidimensional matrix mathematics: Multidimensional matrix equality, addition, subtraction, and multiplication, part 2 of 6,” *Lecture Notes in Engineering and Computer Science*, vol. 2185, 06 2010.
- [4] H. Narumi, *3次元行列の試み*. 元北大院, 2013.
- [5] T. Kousaka, T. Ueta, and H. Kawakami, “Bifurcation of switched nonlinear dynamical systems,” *IEEE Transactions, CASII*, vol. 46, no. 7, pp. 878–885, 1999.
- [6] M. Bernardo, C. Budd, A. R. Champneys, and P. Kowalczyk, *Piecewise-smooth dynamical systems: theory and applications*, vol. 163. 2008.
- [7] Y. A. Kuznetsov, *Elements of applied bifurcation theory*. No. 112 in Applied Mathematical Sciences, Berlin: Springer, 2 ed., 1998.
- [8] T. Ueta, T. Yoshinaga, H. Kawakami, and G. Chen, “A method to calculate neimark-sacker bifurcation in autonomous systems,” *IEICE trans. A*, vol. 83, no. 10, pp. 1141–1147, 2000.
- [9] L. Elsner and V. Monov, “The bialternate matrix product revisited,” *Linear Algebra and its Applications*, vol. 434, no. 4, pp. 1058–1066, 2011.