

遅延 Duffing 方程式の結合系の完全同期解に対する精度保証付き数値計算

高橋和暉* 高安亮紀†

2023 年 3 月 31 日

1 はじめに

精度保証付き数値計算とは、数値計算で発生し得る全ての誤差 (丸め誤差、打ち切り誤差、離散化誤差) を、区間演算を用いて厳密に把握し評価する分野であり、代数的に解くことの難しい問題などの計算機援用証明などに用いられる。

本研究では、遅延 Duffing 方程式の結合系を扱うため、まず初めに遅延 Duffing 方程式について紹介する。遅延 Duffing 方程式とは、

$$\frac{d^2x}{dt^2}(t) = \gamma \frac{dx}{dt}(t) + \alpha x(t) + \beta x(t - \tau) + \epsilon x(t)^3 \tag{1.1}$$

で表される方程式であり、 $\alpha, \beta, \gamma, \epsilon, \tau$ はパラメータである。(1.1) 式は、脳の皮質視床の脳波のモデルとして現れる [1]。

2 研究背景

第 1 節で、遅延 Duffing 方程式は脳の皮質視床の脳波のモデルとして現れると述べた。具体的に、皮質視床のどこに現れるのかというと、図 1 の ϕ_e, ϕ_i の脳波の部分である。図 1 は、皮質視床の相互作用の図であり、Kim ら [1] はこれらの脳波に着目し、数理モデル化を行った。その際に導出されたのが、遅延 Duffing 方程式である。

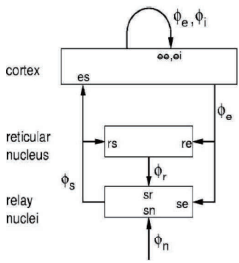


図 1 皮質視床の相互作用 (reference より抜粋)

続いて、なぜ我々が遅延 Duffing 方程式の結合系を扱うかについて述べる。小谷ら [2] は、 ϕ_e, ϕ_i の脳波が 2 つある場合 (ϕ_{e1} と ϕ_{e2} など) の解の同期現象について研究を行った。その結果、位相縮約により、遅延

* 筑波大学システム情報工学研究群
† 筑波大学システム情報系 (takitoshi@risk.tsukuba.ac.jp)

Duffing 方程式の結合系にはいくつかの同期解が存在することが示された。これらの同期解は、基本的には同期しているが崩れる場合があり、それがてんかんの発作に繋がることが知られている。しかし、同期が崩れるメカニズムは未だ解明されていないため、本研究で同期解の精度保証を行うことで、メカニズム解明の先駆けになると考えている。

3 遅延 Duffing 方程式の結合系

本研究では、以下のような弱い相互作用を持った結合系を扱う。

$$\begin{cases} \ddot{x}_1 = \gamma x_1 + \alpha x_1 + \beta x_1(t - \tau) + \epsilon x_1^3 + L(\dot{x}_2 - \dot{x}_1) \\ \ddot{x}_2 = \gamma x_2 + \alpha x_2 + \beta x_2(t - \tau) + \epsilon x_2^3 + L(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) \end{cases} \quad (3.1)$$

パラメータ値はそれぞれ $\alpha = -0.1, \beta = -5.0, \gamma = -2.0, \epsilon = -10.0, \tau = 2.5, L = 0.02$ とする。

小谷ら [2] の研究によって、式 (3.1) には 3 つの同期解が存在する (図 2)。これらの同期解は、位相が完全に一致している解と位相が $\pm \frac{\pi}{3}$ ずれている解の 3 つであり、本研究では、この 3 つの同期解全ての精度保証を行った。

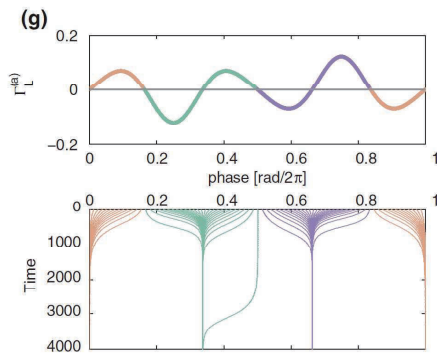


図2 遅延 Duffing 方程式の結合系の位相縮約結果 ([2] より抜粋)

4 フーリエスペクトル法による同期解の求解

同期解 $x_1(t), x_2(t)$ を周期 T の周期関数とし、 $\omega = \frac{2\pi}{T}$ とおくと、 $x_1(t), x_2(t)$ はフーリエ級数を用いて、

$$\begin{aligned} x_1(t) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} a_k e^{ik\omega t} \\ x_2(t) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} b_k e^{ik\omega t} \end{aligned}$$

と表すことができる。また、フーリエ級数の性質から微分及び遅延項は以下のように表現される。

$$\begin{aligned}
\dot{x}_1(t) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} ik\omega a_k e^{ik\omega t}, \quad \dot{x}_2 = \sum_{k \in \mathbb{Z}} ik\omega b_k e^{ik\omega t} \\
\ddot{x}_1(t) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} (-k^2\omega^2) a_k e^{ik\omega t}, \quad \ddot{x}_2(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (-k^2\omega^2) b_k e^{ik\omega t} \\
x_1(t - \tau) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} (a_\tau)_k e^{ik\omega t}, \quad (a_\tau)_k = e^{-ik\omega\tau} a_k \\
x_2(t - \tau) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} (b_\tau)_k e^{ik\omega t}, \quad (b_\tau)_k = e^{-ik\omega\tau} b_k \\
x_1^3(t) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} (a * a * a)_k e^{ik\omega t}, \quad x_2^3(t) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (b * b * b)_k e^{ik\omega t}.
\end{aligned}$$

ここで $a * b * c$ は複素点列 $a = (a_k)_{k \in \mathbb{Z}}, b = (b_k)_{k \in \mathbb{Z}}, c = (c_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ に対する離散畳み込みを表す。

$$(a * b * c)_k := \sum_{\substack{k_1 + k_2 + k_3 = k \\ k_1, k_2, k_3 \in \mathbb{Z}}} a_{k_1} b_{k_2} c_{k_3}.$$

これらを方程式 (3.1) に代入すると可算無限個の代数方程式となる。

$$\begin{aligned}
f_k(\omega, a, b) &= k^2\omega^2 a_k + \gamma ik\omega a_k + \alpha a_k + \beta a_\tau + \epsilon(a * a * a)_k + Lik\omega(b_k - a_k) \\
g_k(\omega, a, b) &= k^2\omega^2 b_k + \gamma ik\omega b_k + \alpha b_k + \beta b_\tau + \epsilon(b * b * b)_k + Lik\omega(a_k - b_k).
\end{aligned}$$

そして、代数方程式の未知数は $\mathbf{X} = (\omega, a, b)$ で未知数 ω を決定する位相条件が必要である。そのため、典型的な積分位相条件を与える。

$$\eta(\omega, a, b) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (a_k ik(a_0)_{-k} + b_k ik(b_0)_{-k}) = 0.$$

ここで、 a_0, b_0 は参照軌道 x_0 の係数である。そして、 $\mathbf{X}$ に対する写像 F を次のように定義する。

$$F(\mathbf{X}) := \begin{bmatrix} \eta(\omega, a, b) \\ f(\omega, a, b) \\ g(\omega, a, b) \end{bmatrix}.$$

フーリエスペクトル法で近似解を計算するために、波数 N で打ち切った写像 $F^{(N)}$ を定義する。

$$F^{(N)}(\mathbf{X}^{(N)}) := \begin{bmatrix} \eta(\omega, a^{(N)}, b^{(N)}) \\ f^{(N)}(\omega, a^{(N)}, b^{(N)}) \\ g^{(N)}(\omega, a^{(N)}, b^{(N)}) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{X}^{(N)} := (\omega, a^{(N)}, b^{(N)}) \in \mathbb{C}^{4N+3}.$$

そして、波数 N で打ち切った写像に対して、ニュートン法によって、 $F^{(N)}(\mathbf{X}^{(N)}) \approx 0$ を満たす近似解

$$\bar{\mathbf{X}}^{(N)} = (\bar{\omega}, \bar{a}_{-N}, \dots, \bar{a}_N, \bar{b}_{-N}, \dots, \bar{b}_N) \in \mathbb{C}^{4N+3}$$

を数値計算する。

また、写像 $F^{(N)}$ のヤコビ行列 $DF^{(N)}$ は、

$$DF^{(N)}(\mathbf{X}^{(N)}) = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & \partial_{a_j} \eta & \cdots & \cdots & \partial_{b_j} \eta & \cdots \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots & \\ \partial_{\omega} f_k^{(N)} & \cdots & \partial_{a_j} f_k^{(N)} & \cdots & \cdots & \partial_{b_j} f_k^{(N)} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots & \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots & \\ \partial_{\omega} g_k^{(N)} & \cdots & \partial_{a_j} g_k^{(N)} & \cdots & \cdots & \partial_{b_j} g_k^{(N)} & \cdots \\ \vdots & & \vdots & & & \vdots & \end{bmatrix}$$

と表され、それぞれの要素は、

$$\begin{aligned}
 \partial_{a_j} \eta &= i j (a_0)_{-j} \\
 \partial_{b_j} \eta &= i j (b_0)_{-j} \\
 \partial_{\omega} f_k^{(N)} &= 2k^2 \omega a_k + \gamma i k a_k - \beta i k \tau a_{\tau} + L i k (b_k - a_k) \\
 \partial_{\omega} g_k^{(N)} &= 2k^2 \omega b_k + \gamma i k b_k - \beta i k \tau b_{\tau} + L i k (a_k - b_k) \\
 \partial_{a_j} f_k^{(N)} &= (k^2 \omega^2 + \gamma i k \omega + \alpha + \beta e^{-i k \omega \tau} - L i k \omega) \delta_{k,j} + 3\epsilon (a * a)_{k-j} \\
 \partial_{b_j} f_k^{(N)} &= L i k \omega \delta_{k,j} \\
 \partial_{a_j} g_k^{(N)} &= L i k \omega \delta_{k,j} \\
 \partial_{b_j} g_k^{(N)} &= (k^2 \omega^2 + \gamma i k \omega + \alpha + \beta e^{-i k \omega \tau} - L i k \omega) \delta_{k,j} + 3\epsilon (b * b)_{k-j}
 \end{aligned}$$

となる。

ニュートン法の収束条件を $\|F^{(N)}(\bar{X})\|_1 < 5 \times 10^{-10}$ として、適当な初期値から数値計算を行ったところ、3つの近似同期周期解を得た (図3)。

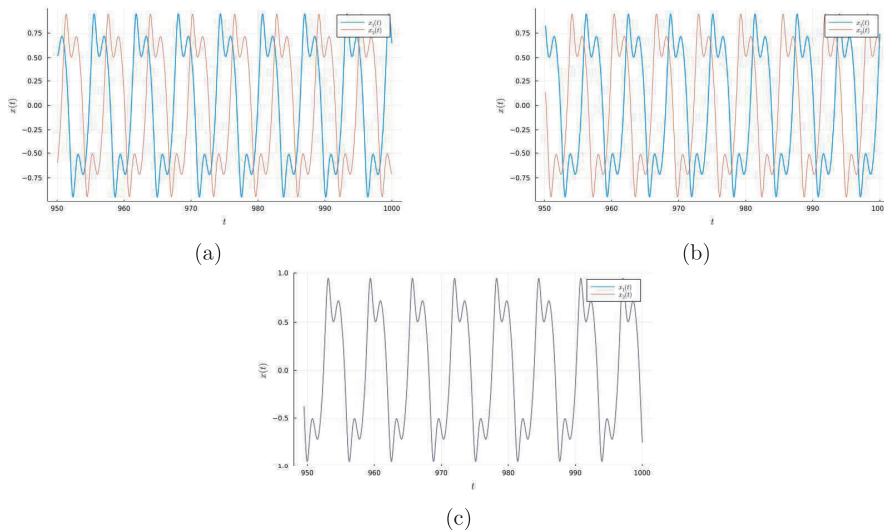


図3 Newton 法で得られた近似同期周期解の概形

5 Newton-Kantorovich 型定理による精度保証

まず初めに、検証に用いる Banach 空間の定義をする。

Banach 空間 X

Banach 空間 X を次のように定める。はじめに重み付き ℓ^1 空間を重み $w_k = \nu^{|k|}$ ($\nu = 1.05$) として次のように定める。

$$\ell_{\nu}^1 := \left\{ a = (a_k)_{k \in \mathbb{Z}} : a_k \in \mathbb{C}, \|a\|_w := \sum_{k \in \mathbb{Z}} |a_k| \nu^{|k|} < \infty \right\}.$$

そして、検証に用いる関数空間 X は

$$X := \mathbb{C} \times \ell_{\nu}^1 \times \ell_{\nu}^1, \quad \bar{x} = (\omega, a, b), \quad \omega \in \mathbb{C}, \quad a, b \in \ell_{\nu}^1$$

と定め、そのノルムを

$$\|\bar{x}\|_X := \max\{|\omega|, \|a\|_w, \|b\|_w\}$$

として定義する。このとき、 X は Banach 空間となる。

続いて、Newton-Kantorovich 型定理 [3] の紹介をする。

定理 5.1. X, Y を Banach 空間、 $\mathcal{L}(X, Y)$ を X から Y への有界線形作用素全体の集合とする。有界線形作用素 $A^\dagger \in \mathcal{L}(X, Y)$, $A \in \mathcal{L}(Y, X)$ を考え、作用素 $F: X \rightarrow Y$ が C^1 -Fréchet 微分可能とする。また A が単射で $AF: X \rightarrow X$ とする。いま、 $\bar{x} \in X$ に対して、正定数 Y_0, Z_0, Z_1 , および非減少関数 $Z_2(r)$ ($r > 0$) が存在して、次の不等式

$$\begin{aligned} \|AF(\bar{x})\|_X &\leq Y_0 \\ \|I - AA^\dagger\|_{\mathcal{L}(X)} &\leq Z_0 \\ \|A(DF(\bar{x}) - A^\dagger)\|_{\mathcal{L}(X)} &\leq Z_1 \\ \|A(DF(b) - DF(\bar{x}))\|_{\mathcal{L}(X)} &\leq Z_2(r)r, \quad \forall b \in \overline{B(\bar{x}, r)} \end{aligned}$$

をみたすとする。このとき、*radii polynomial* を以下で定義する。

$$p(r) := Z_2(r)r^2 - (1 - Z_1 - Z_0)r + Y_0.$$

これに対し、 $p(r_0) < 0$ となる $r_0 > 0$ が存在すれば、 $F(\bar{x}) = 0$ をみたす解 $\hat{x}$ が $b \in \overline{B(\bar{x}, r)}$ 内に一意存在する。

証明. まず初めに、 X, Y を Banach 空間とし、写像 $F: X \rightarrow Y$ に対して

$$F(x) = 0 \quad \text{in } Y$$

という作用素方程式を考える。簡易ニュートン写像 $T: X \rightarrow X$ を

$$T(x) := x - AF(x)$$

と定義する。この時、写像 T が閉球 $\overline{B(\bar{x}, r_0)}$ において縮小写像となることを示す。まず

$$DT(x) = I - ADF(x), \quad x \in X$$

から、任意の $x \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}$ に対して、仮定より

$$\begin{aligned} \|DT(x)\|_{\mathcal{L}(X)} &= \|I - ADF(x)\|_{\mathcal{L}(X)} \\ &\leq \|I - AA^\dagger\|_{\mathcal{L}(X)} + \|A(A^\dagger - DF(\bar{x}))\|_{\mathcal{L}(X)} + \|A(DF(\bar{x}) - DF(x))\|_{\mathcal{L}(X)} \\ &\leq Z_0 + Z_1 + Z_2(r_0)r_0. \end{aligned}$$

そして、任意の $x \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}$ に対して、平均値の定理より

$$\begin{aligned} \|T(x) - \bar{x}\|_X &\leq \|T(x) - T(\bar{x})\|_X + \|T(\bar{x}) - \bar{x}\|_X \\ &\leq \sup_{b \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}} \|DF(b)\|_{\mathcal{L}(X)} \|x - \bar{x}\|_X + \|AF(\bar{x})\|_X \\ &\leq (Z_0 + Z_1 + Z_2(r_0)r_0)r_0 + Y_0 \\ &= p(r_0) + r_0. \end{aligned}$$

よって $p(r_0) < 0$ ならば、 $\|T(x) - \bar{x}\|_X < r_0$ 。よって $T(x) \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}$ 。

次に X の距離として、 $d(x, y) := \|x - y\|_X, x, y \in X$ と定義すると、

$$\begin{aligned} d(T(x), T(y)) &\leq \sup_{b \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}} \|DF(b)\|_{\mathcal{L}(X)} d(x, y) \\ &\leq (Z_0 + Z_1 + Z_2(r_0)r_0)d(x, y), \quad x, y \in \overline{B(\bar{x}, r_0)}. \end{aligned}$$

このとき $p(r_0) < 0$ より

$$Z_0 + Z_1 + Z_2(r_0)r_0 + \frac{Y_0}{r_0} < 1.$$

よって $k := Z_0 + Z_1 + Z_2(r_0)r_0 < 1$ となるため、 T は $\overline{B(\bar{x}, r_0)}$ 上で縮小写像となる。

したがって、Banach の不動点定理より、ただ一つの不動点 $\bar{x}$ が $\overline{B(\bar{x}, r_0)}$ に存在し、 A の単射性より、この不動点は写像 F の零点となる、i.e., $F(\bar{x}) = 0$. $\square$

6 数値検証結果

第 5 章の定理 5.1 の各評価を計算し、radii polynomial を求めた。その値とグラフが以下の表と図である。各表図の記号は、図 3 の (a),(b),(c) に対応している。また、各評価の値は区間演算の上界の値を取っている。以上の結果から、小谷ら [2] の研究で見つかった 3 つの同期周期解が、数値計算で得た近似周期解の近傍に一意に存在することが示された。

Upper bounds	Values
Y_0	$4.482260980713472 \times 10^{-9}$
Z_0	$4.1903524681480545 \times 10^{-11}$
Z_1	0.024451219147340626
$Z_2(r) := Z_2^{(3)}r^2 + Z_2^{(2)}r$	
$Z_2^{(3)}$	1750.6052729555352
$Z_2^{(2)}$	21951.09469957664
r_0	$4.595079775585898 \times 10^{-9}$
Run time	16.34s

図 4 Upper bounds of $Y_0, Z_0, Z_1, Z_2(r)$ (a)

Upper bounds	Values
Y_0	$4.399654509799808 \times 10^{-9}$
Z_0	$6.137022986667175 \times 10^{-11}$
Z_1	0.024451307827557448
$Z_2(r) := Z_2^{(3)}r^2 + Z_2^{(2)}r$	
$Z_2^{(3)}$	1749.990900409619
$Z_2^{(2)}$	21943.229090388704
r_0	$4.510385744185107 \times 10^{-9}$
Run time	16.54s

図 6 Upper bounds of $Y_0, Z_0, Z_1, Z_2(r)$ (b)

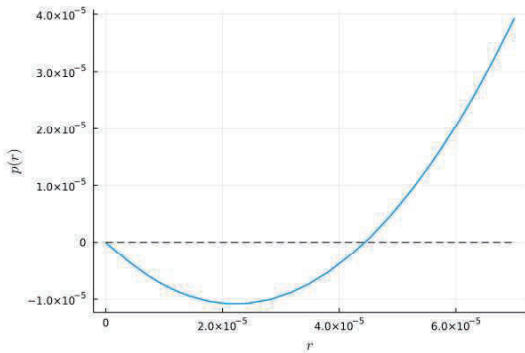


図 5 Profile of the radii polynomial (a)

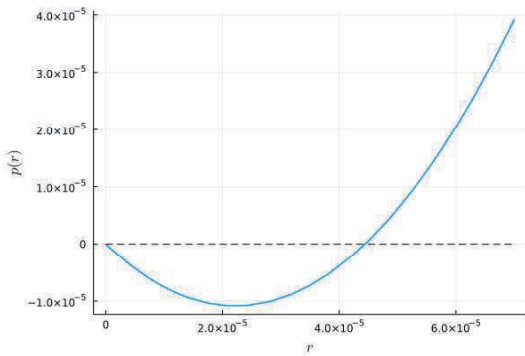


図 7 Profile of the radii polynomial (b)

Upper bounds	Values
Y_0	$4.3143652054134616 \times 10^{-9}$
Z_0	$7.775872669515562 \times 10^{-11}$
Z_1	0.024592983372274058
$Z_2(r) := Z_2^{(3)}r^2 + Z_2^{(2)}r$	
$Z_2^{(3)}$	2924.6994431078965
$Z_2^{(2)}$	36856.01946057287
r_0	$4.423882986206321 \times 10^{-9}$
Run time	16.66s

図 8 Upper bounds of $Y_0, Z_0, Z_1, Z_2(r)$ (c)

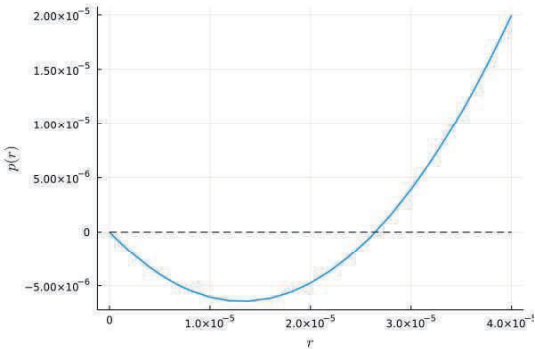


図 9 Profile of the radii polynomial (c)

7 まとめ

本研究では、弱い相互作用を加えた遅延 Duffing 方程式の結合系を扱い、小谷ら [2] の研究で得られた 3 つの同期周期解を Newton-Kantorovich 型定理を用いて精度保証した。これらの同期解は安定であるが、扱った方程式には、図 2 の Γ の零点から、不安定な解も 3 つ存在するように思われる。今後の展望としては、それらの不安定な同期解を捉え、精度保証を行うことである。また、同期現象に関する精度保証付き数値計算は、未だ確立されたものではないため、更なる探求を行いたいと思う。

参考文献

[1] J.W. Kim, P.A. Robinson, Compact dynamical model of brain activity, Phys. Rev. E, 75, 031907, (2007).

[2] K. Kotani, I. Yamaguchi, Y. Ogawa, Y. Jimbo, H. Nakao and G.B. Ermentrout, Adjoint Method Provides Phase Response Functions for Delay-Induced Oscillations, Phys. Rev. Lett., 109, 044101, (2012).

[3] J.P. Lessard, J.M. James, A. Hungria, Rigorous numerics for analytic solutions of differential equations: The radii polynomial approach , Mathematics of Computation 85, 1427-1459, (2015).