

反応拡散系に対する大域的分岐構造の数値計算法とその応用

金沢大学 大学院自然科学研究科 矢留 雅亮

金沢大学 理工研究域数物科学系, JST さきがけ研究員 長山 雅晴

京都大学 数理解析研究所 上田 肇一

1 はじめに

1952 年の Hodgkin と Huxley による進行パルス波の発見 [1] と Turing による拡散誘導不安定化 [2] の報告を契機に反応拡散系に対するパターン形成の研究は多くの研究者によってなされてきた。1993 年以前では解の定性的な性質を中心とした研究が行なわれており、空間 1 次元では内部遷移層を持つ定常解の存在や安定性、速度の速い進行パルス波解と遅い進行パルス波解の存在や安定性等が示されている。空間 2 次元ではリング波やスパイラル波が数値計算により発見されており、2 つの向かい合う進行パルス波やリング波は対消滅することが数値計算により確かめられている。1993 年、J. Pearson の論文 [3] がきっかけとなり遷移過程等の一時的なパターンダイナミクスに注目した研究が行なわれるようになった。M. Mimura らは発熱反応拡散モデルを用いて進行パルス波の反射現象や分裂現象、脈動進行パルス波の出現、2 次元におけるリング波やスパイラル波の崩壊現象といった様々な時空間パターンの出現を報告した [4]。また、D. Ueyama と M. Nishiura は Gray-Scott モデル [5] を用いて遷移中に現れる自己複製パターンや時空カオスに対するメカニズムの解析を行った [6]。これらの遷移パターンを数理解析する 1 つの方法は定常解の大域的分岐構造と不安定定常解の不安定多様体の行き先を調べることである。これまでの研究では、脈動進行パルス波の分裂現象や反射現象のような定常解の分岐構造だけでは理解できない遷移パターンに対するメカニズムの数理解析はほとんど行なわれていない。その理由の 1 つは、これまで脈動進行パルス波を含む分岐構造を数値的に求める計算手法が確立していなかったことが原因だと考えられる。我々は定常解の分岐構造だけでは理解できない遷移パターンに対するメカニズムを理解することを目的としており、そのためのツールとして反応拡散系に対する大域的分岐構造を求める数値計算法を開発している。本論文ではこのツールを用いて双安定反応拡散系に現れるパルス波の遷移パターンダイナミクスの理解を試みる。

本論文では次のような構成になっている。第 2 章では本論文で取り扱うパルス波の定義を行う。第 3 章では反応拡散系に現れる進行 (定常) パルス波に対する数値計算法について解説する。第 4 章ではパルス波の大域的分岐構造を数値的に求める方法について解説する。第 5 章では反応拡散系に現れる脈動進行 (定常) パルス波に対する数値計算法に

ついて解説する。第6章では第3章から第5章で説明した数値計算法を用いて双安定反応拡散系に現れる遷移パターンダイナミクスについて報告する。第7章では本論文のまとめと今後の課題を述べる。

2 パルス波の解の定義

この節では次のような空間1次元 n 変数反応拡散系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：

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

ただし,

$$V(t, x) = (V_1(t, x), V_2(t, x), \dots, V_n(t, x)) : \mathbf{R}_+ \times \mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{R}^n,$$

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

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

である。また、 E は拡散項を無視した常微分方程式系

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

の漸近安定な平衡点とする。図2.1はある2変数反応拡散系に現れる代表的な4種類のパルス波である [7, 8]。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。

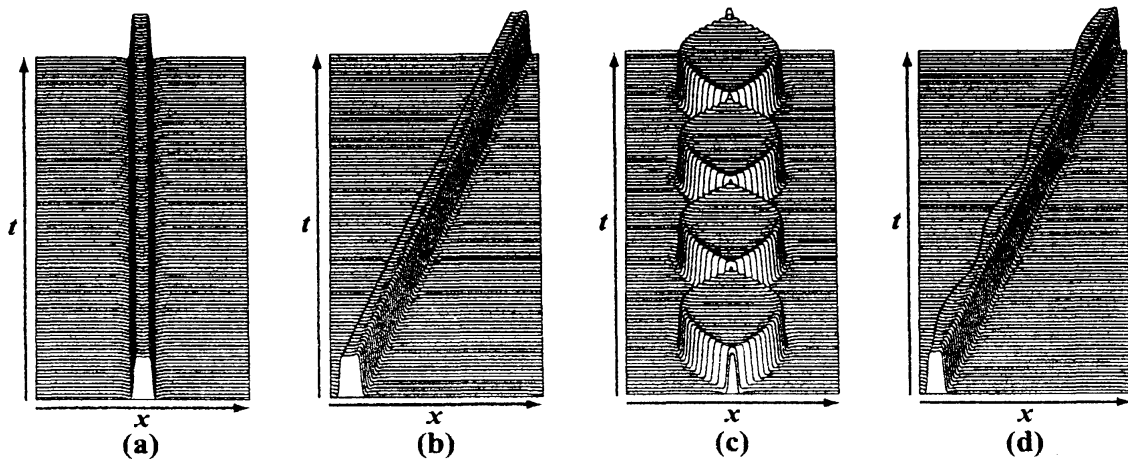


図 2.1: 4 種類のパルス波。 (a) 定常パルス波, (b) 進行パルス波, (c) 脈動定常パルス波, (d) 脈動進行パルス波。

定義 2.1 反応拡散系 (2.1) の解 $V(t, x)$ 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 ($U(x)$) が存在することである：

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

定義 2.2 反応拡散系 (2.1) の解 $V(t, x)$ 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 ($U(z), c$) が存在することである：

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

ただし, $z = x - ct$ である.

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数値的に求めることができない. しかしながら, 十分長い区間 $I = (-L, L)$ を用意すれば, パルス波は区間の両端に向かうにつれ指数関数的に減少するため区間の両端で (2.1) の第 2 式を満たすと期待できる. それゆえ, パルス波を数値的に求める必要条件として L を十分大きくする.

3 進行パルス波の数値計算法

この節では定義 2.2 で与えられた進行パルス波の数値計算法について解説する¹。最初に定義 2.2 を数値的に求めるため次のように書き換える。

$$\begin{cases} DU_{zz} + cU_z + F(U) = 0, & z \in [-L, L), \\ U(-L) = U(L), & U_z(-L) = U_z(L). \end{cases} \quad (3.1)$$

ここでは区間を離散して得られる常微分方程式に対し Newton 法を適用して解 (U, c) を数値的に求める。区間 $2L$ を N 等分して、間隔 $\Delta z = 2L/N$ で離散化し、各点 $z_j = -L + (j-1)\Delta z$ における U_i, F_i の値をそれぞれ $u_{i,j}, f_{i,j}$ と書く。このとき (3.1) の拡散項、線形移流項に 2 次精度中心差分近似を用いると

$$\begin{cases} H_{i,j} \equiv d_i \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta z^2} + c \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{2\Delta z} + f_{i,j} = 0, \\ u_{i,0} = u_{i,N}, \quad u_{i,N+1} = u_{i,1} \end{cases}$$

となる。よって、 nN 次元の連立 1 次元方程式 ($H_{i,j} = 0$) が作られたが、未知数は $(u_{i,j}, c)$ の $nN + 1$ 個であるため方程式を解くことができない。そこで、位相条件 (Phase Condition) と呼ばれるパルス波の空間平行移動に対する自由度を拘束するための条件を導入する。ここでは位相条件 $P = 0$ が与えられたとして、位相条件の詳細は後述する。ここで $A_{i,j}$ を $A_{(i-1)N+j}$ と置き換え、 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{nN})$, $\mathbf{H} = (H_1, \dots, H_{nN})$ を導入すると $nN + 1$ 次元の連立 1 次元方程式

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

が導かれる。この方程式に対し Newton 法を適用して $(\mathbf{u}, c)$ を数値的に求める。Newton 法による主な計算は以下の連立 1 次元方程式

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) & \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial c}(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) \\ \frac{\partial P}{\partial \mathbf{u}}(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) & \frac{\partial P}{\partial c}(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u}^{(\nu)} \\ \Delta c^{(\nu)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) \\ P(\mathbf{u}^{(\nu)}, c^{(\nu)}) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

を解いて解の更新を行うことである²：

$$\begin{cases} \mathbf{u}^{(\nu+1)} = \mathbf{u}^{(\nu)} - \Delta \mathbf{u}^{(\nu)}, \\ c^{(\nu+1)} = c^{(\nu)} - \Delta c^{(\nu)}. \end{cases}$$

¹定常パルス波の数値計算法は進行速度を $c = 0$ とおく。

² $\mathbf{A}$ と $\mathbf{b}$ が N 次元ベクトル値であるとき $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{b}}$ は $\left(\frac{\partial A_i}{\partial b_j} \right)_{1 \leq i, j \leq N}$ を表し $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{b}}$ を簡潔に $\mathbf{A}_{\mathbf{b}}$ と表記する。これ以降はこの表記規則に従って記述する。また、括弧つきの上添え字 (ν) は Newton 法による反復回数を表し、表記を簡潔に表したいときは反復回数の添え字を省略する。

連立1次方程式(3.2)の解法に直接法を用いることは可能であるが、ここでは H_u が疎行列であることに注目して、行列計算を少し工夫することにより直接法を用いるよりも高速計算できる方法を解説する。最初に、(3.2)の Δu の式を変形して

$$\Delta u = \left(\frac{\partial H}{\partial u} \right)^{-1} H - \left(\frac{\partial H}{\partial u} \right)^{-1} \frac{\partial H}{\partial c} \Delta c \quad (3.3)$$

とおく。ここで、

$$\begin{cases} \frac{\partial H}{\partial u} \Delta \tilde{u} = H, \\ \frac{\partial H}{\partial u} \Delta \tilde{c} = \frac{\partial H}{\partial c} \end{cases} \quad (3.4)$$

の計算を行い($\Delta \tilde{u}, \Delta \tilde{c}$)を求め(3.3)を

$$\Delta u = \Delta \tilde{u} - \Delta \tilde{c} \Delta c \quad (3.5)$$

と置き変える。(3.5)を(3.2)の Δc の式に代入すれば

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

となるので、 Δc の計算ができる。 Δc が求まれば(3.5)から Δu も求まるので解の更新ができる。この方法を用いたとき計算時間を最も要する部分は(3.4)の連立1次方程式を解く部分であるが、 H_u は帯行列を持つ疎行列であるため反復法が適用できる。例えば、不完全LU分解の前処理付きCGS法(ILUCGS法)を用いる。この計算は必ずしも解が収束する保証はないが、計算速度は直接法よりも非常に速くなり効率良い方法といえる。また、反復法では H_u に対する密行列のメモリーを必要としないためメモリーの節約にもなる。

3.1 位相条件 (Phase Condition)

パルス波は空間平行移動の自由度を持っている。すなわち、 $(U(z), c)$ が(3.1)の解ならば任意の σ に対し平行移動した $(U(z+\sigma), c)$ も(3.1)の解となる。このように考えると、パルス波は空間方向に解が無数個存在しており一意ではない。そこで、位相条件 (Phase Condition) と呼ばれる空間平行移動の任意性をなくし解を1つに定める方法を考える。位相条件の与え方は色々あるが、最初に分かりやすい例を挙げる。いま、図3.1(a)のように空間方向に解が無数個存在しているとすると、このとき、位相条件として z 軸上のある位置 $z = \hat{z}$ において解の値 $\hat{U}$ で固定する方法である。すなわち

$$U(\hat{z}) = \hat{U} \quad (3.6)$$

を満たす $\hat{z}$ と $\hat{U}$ を適当に選ぶことである。例えば、 $\hat{z}$ を空間上の適当なところを選び、 $\hat{U}$ をパルス波の最大値と最小値の中間値として選ぶと図3.1(b)のように無数個の中から解

が2つ得られるが一意に定まらない。そこで、 $\hat{z}$ の選び方としてパルス波のバック波が存在する範囲に制限を加えると図 3.1(c) のように解が一意に定まる。このように、 $\hat{z}$ と $\hat{U}$ の選び方次第では解が一意に定まらないので Newton 法が収束しない可能性が高くなる。この方法はあらかじめ解形状の情報が必要なため汎用性のある方法とはいえない。

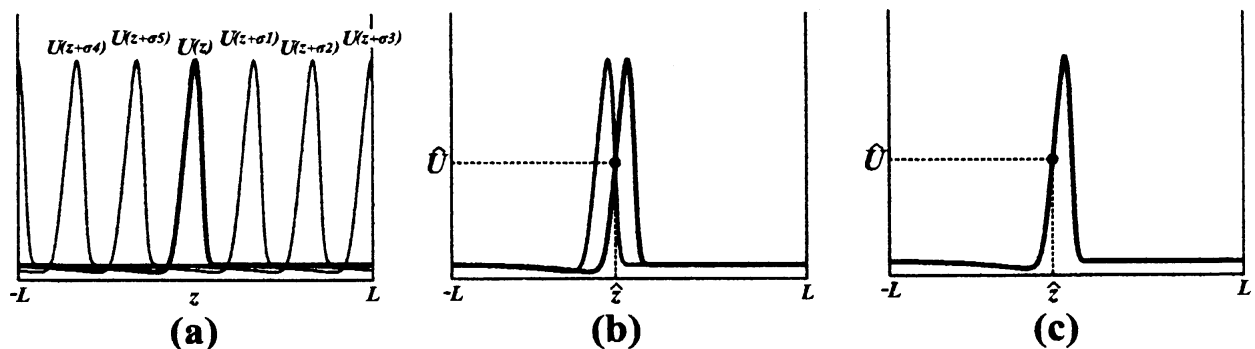


図 3.1: 位相条件の説明図

次に、比較的汎用性のある位相条件について解説する [10]. いま、あるパラメータ $\lambda = \lambda_1$ に対する (3.1) の解 $(\bar{U}(z; \lambda_1), \bar{c})$ は求まっているとして、 $\lambda = \lambda_2 \equiv \lambda_1 + \Delta\lambda$ の解 $(\tilde{U}(z; \lambda_2), \tilde{c})$ を求めたいとする。このとき、任意の σ に対し $(\tilde{U}(z + \sigma; \lambda_2), \tilde{c})$ も解となるので位相条件を適用して解を一意に定める。位相条件の与え方として $\tilde{U}(z + \sigma; \lambda_2)$ と $\bar{U}(z; \lambda_1)$ の距離が最小となるように与える。すなわち

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

が最小となるような σ を選ぶことである。 $\sigma = \hat{\sigma}$ のとき $M(\sigma)$ が最小値であるとする

$$\frac{dM}{d\sigma}(\hat{\sigma}) = 0$$

を満たすので、これより

$$\int_{-L}^L (\tilde{U}(z + \hat{\sigma}) - \bar{U}(z)) \cdot \tilde{U}_z(z + \hat{\sigma}) dz = 0 \quad (3.7)$$

の関係式が導かれる。ここで、未知数 $U(z)$ が (3.7) の $\tilde{U}(z + \hat{\sigma})$ を満たすように与えて部分積分を用いると、(3.7) は

$$\frac{1}{2} [\|U(z)\|^2]_{-L}^L - [\bar{U}(z) \cdot U(z)]_{-L}^L + \int_{-L}^L \bar{U}_z(z) \cdot U(z) dz = 0 \quad (3.8)$$

となる。一般には (3.8) を位相条件として用いるが周期境界条件下ならば、(3.8) は

$$\int_{-L}^L \bar{U}_z(z) \cdot U(z) dz = 0 \quad (3.9)$$

となる。この位相条件は (3.6) と比べるとあらかじめ解形状を知らなくてすむため汎用性のある方法といえる。他にも位相条件として、2つ目に紹介した方法の類似で $\tilde{U}_z(z+\sigma; \lambda_2)$ と $\bar{U}_z(z; \lambda_1)$ の距離が最小となるように与える方法もある。同じ計算手法を用いて周期境界条件下ならば

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

となる。2階微分を避けると最終的な位相条件は

$$\int_{-L}^L \left(\bar{c} \bar{U}(z) + \mathbf{F}(\bar{U}) \right) \cdot U_z(z) dz = 0 \quad (3.10)$$

となる。位相条件としてどの条件を選ぶかは問題であるが、パルス波の数値計算の場合、(3.6), (3.9), (3.10) のいずれの位相条件も適用できる。

4 擬似弧長法 (Pseudo-arclength continuation methods)

この節では前節の定常問題に対しパラメータ λ を変えながら解の枝を追いかける方法を解説する。表記を簡単にするため、 $\mathbf{w} \equiv (\mathbf{u}, c)$ 、 $\mathbf{G}(\mathbf{w}, \lambda) \equiv (H_1, \dots, H_{nN}, P)$ を導入して、非線形連立方程式

$$\mathbf{G}(\mathbf{w}, \lambda) = 0 \quad (4.1)$$

の解を求める問題に帰着させる。いま、 $(\mathbf{w}_1, \lambda_1)$ は (4.1) の解として、 $\lambda = \lambda_2 \equiv \lambda_1 + \Delta\lambda$ の解 $\mathbf{w}_2$ を求める状況を考える。最も簡単な方法は $\Delta\lambda$ を微小値に選び、初期値を

$$\mathbf{w}_2^{(1)} = \mathbf{w}_1 \quad (4.2)$$

とにおいて Newton 法を適用することである (図 4.1)。 $\lambda = \lambda_2$ で解が存在しているならばパラメータの変化量を小さくすれば Newton 法によって収束することが十分に期待できる。他の方法として解の枝に対する接線ベクトル上を用いた方法がある。 $\mathbf{w}$ をパラメータの関数とみなして $\mathbf{w} = \mathbf{w}(\lambda)$ とおき、 $\mathbf{G}(\mathbf{w}(\lambda), \lambda) = 0$ 上の $(\mathbf{w}_1, \lambda_1)$ に対する接線ベクトル上に初期値をとる。すなわち、連立 1 次方程式

$$\mathbf{G}_w \dot{\mathbf{w}}_1 = \mathbf{G}_\lambda \quad (4.3)$$

を解き

$$\mathbf{w}_2^{(1)} = \mathbf{w}_1 - \Delta\lambda \dot{\mathbf{w}}_1 \quad (4.4)$$

を初期値として Newton 法を適用する (図 4.2)。連立 1 次方程式 (4.3) の解法には定常問題の場合 $\mathbf{G}_w$ が (3.2) のヤコビ行列に対応するので反復法を用いた計算法が適用できる。しかしながら、これらの方法はサドル・ノード分岐点がある場合、それ以上の解の枝を追跡することができない。この解決策の 1 つに擬似弧長法を用いた Newton 法がある [9]。この方法の原理は図 4.3 のように接線ベクトル $\mathbf{b}$ に対し垂直な方向へ解を収束させてい

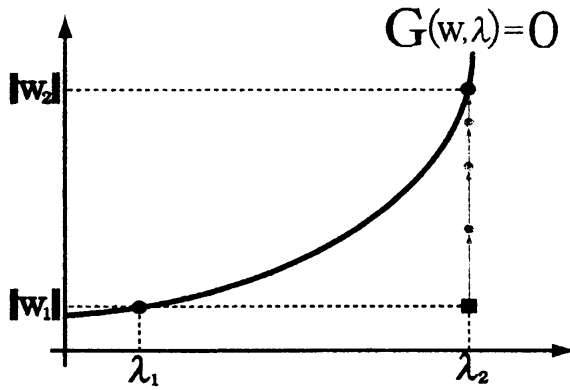


図 4.1: 初期値を (4.2) とおいたときの Newton 法の概略図. 横軸はパラメータ, 縦軸は w のノルム.

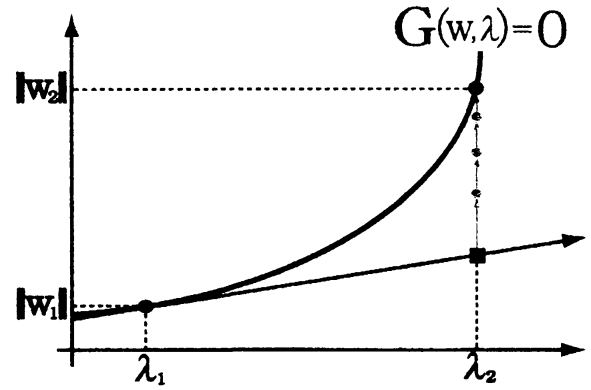


図 4.2: 初期値を (4.4) とおいたときの Newton 法の概略図. 横軸はパラメータ, 縦軸は w のノルム.

く方法である. 擬似弧長法は接線方向を座標系 s にとり w, λ を s に依存する関数として与える. a と b はそれぞれ $a = (w_2 - w_1, \lambda_2 - \lambda_1)$, $b = (\dot{w}_1, \dot{\lambda}_1)$ で, θ は a と b のなす角である. ただし, $\cdot = d/ds$ で, b は正規化ベクトル $\|b\| = 1$ とする. このとき, 関係式 $a \cdot b = \|a\| \|b\| \cos \theta$ から

$$K(w_2(s), \lambda_2(s)) \equiv (w_2 - w_1) \cdot \dot{w}_1 + (\lambda_2 - \lambda_1) \dot{\lambda}_1 - \Delta s = 0$$

が成り立つ. ただし, Δs はパラメータの変化量を調整するもので適当な値を与える. これより, 非線形連立方程式

$$\begin{cases} G(w_2(s), \lambda_2(s)) = 0, \\ K(w_2(s), \lambda_2(s)) = 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

がつくられ Newton 法を適用して未知数 $(w_2(s), \lambda_2(s))$ を求める. この方法は擬似弧長法 (Pseudo-arclength continuation method) と呼ばれサドル・ノード分岐点後の解の追跡が可能となる. (4.5) に対し Newton 法を適用すると $(\dot{w}_1, \dot{\lambda}_1)$ が既知の値である必要があるため接線方向の計算が必要になる. いま, $(\dot{w}_1, \dot{\lambda}_1)$ が既知の値として次の接線方向 $(\dot{w}_2, \dot{\lambda}_2)$ を求めることを考える. これは $\Delta s = s_2 - s_1$ に注意して (4.5) に対し s_2 で微分を行えば

$$\begin{pmatrix} G_w(w_2^*, \lambda_2^*) & G_\lambda(w_2^*, \lambda_2^*) \\ \dot{w}_1 & \dot{\lambda}_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{w}_2 \\ \dot{\lambda}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

と接線方程式が与えられる. ただし, (w_2^*, λ_2^*) は (4.5) の解とする. 連立 1 次方程式 (4.6) の解法には定常問題の場合, 前節の反復法を用いた計算法が適用できる. これより接線方向 $(\dot{w}_2, \dot{\lambda}_2)$ が求まるので, 次の解の初期値は

$$\begin{pmatrix} w_3^{(1)} \\ \lambda_3^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_2 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} + \Delta s \begin{pmatrix} \dot{w}_2 \\ \dot{\lambda}_2 \end{pmatrix}$$

と与える。しかしながら、Newton 法による最初の 1 回目の接線方向は求められないので近似的に与える。例えば、2 つの初期値 (w_0, λ_0) , (w_1, λ_1) を用意して

$$\tilde{w}_1 = \frac{w_1 - w_0}{\lambda_1 - \lambda_0}, \quad \tilde{\lambda}_1 = \frac{w_1 - w_0}{\lambda_1 - \lambda_0}$$

とおいたベクトルを正規化する方法がある。

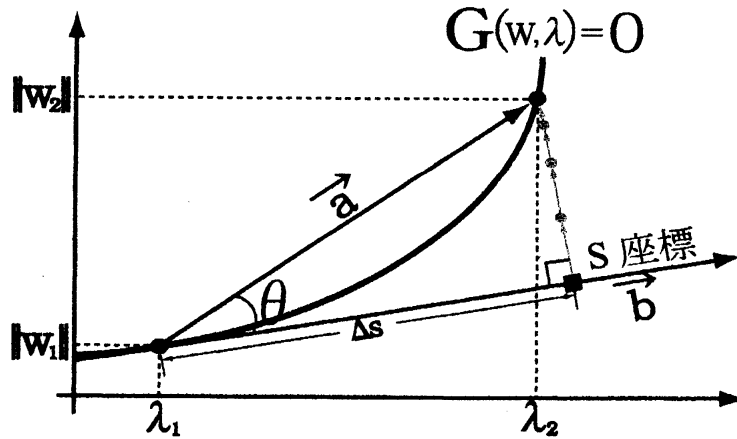


図 4.3: 擬似弧長法を用いた Newton 法の概略図。横軸はパラメータ, 縦軸は w のノルム。

5 脈動進行パルス波の数値計算法

この節では定義 2.4 で与えられた脈動進行パルス波の数値計算法について解説する³。最初に定義 2.4 を数値的に求めるため次のように書き換える：

$$\begin{cases} U_t = DU_{zz} + cU_z + F(U), & t \in [0, T], \quad z \in [-L, L], \\ U(0, z) = U(T, z), & z \in [-L, L], \\ U(t, -L) = U(t, L), \quad U_z(t, -L) = U_z(t, L), & t \in [0, T]. \end{cases} \quad (5.1)$$

(5.1) に対し周期を 1 に固定するため $\tau = t/T$ と変数変換を行う：

$$\begin{cases} U_\tau = T(DU_{zz} + cU_z + F(U)), & \tau \in [0, 1], \quad z \in [-L, L], \\ U(0, z) = U(1, z), & z \in [-L, L], \\ U(\tau, -L) = U(\tau, L), \quad U_z(\tau, -L) = U_z(\tau, L), & \tau \in [0, 1]. \end{cases} \quad (5.2)$$

³脈動定常パルス波の数値計算法は進行速度を $c = 0$ とおく。

初期値 $U(0, z)$ に対し (5.2) を用いて時間発展した解を $\Phi(\tau, z; U(0, z), T, c)$ とする。このとき (5.2) の時間 t に対する境界条件から

$$H(U(0, z), T, c) \equiv \Phi(1, z; U(0, z), T, c) - U(0, z) = 0 \quad (5.3)$$

が成り立つ。この関係式を満たす $(U(0, z), T, c)$ を Newton 法を用いて求める。しかしながら、後述するような離散化を行うと方程式 (5.3) だけでは未知数 (U, T, c) を求められない。そのため、時空間に対するパルス波の位相条件を追加する。ここでは、時間方向の位相条件を

$$P_1(U(0, z), T, c) \equiv \int_0^1 \int_{-L}^L \left(\bar{D} \bar{U}_{zz}(t, z) + \bar{c} \bar{U}_z(t, z) + F(\bar{U}(t, z)) \right) \cdot U(t, z) dz dt = 0 \quad (5.4)$$

と選び、空間方向の位相条件を

$$P_2(U(0, z), T, c) \equiv \int_{-L}^L U(0, z) \cdot \bar{U}_z(0, z) dz = 0 \quad (5.5)$$

と選ぶ。ただし、 $(\bar{U}, \bar{T}, \bar{c})$ はあるパラメータ $\bar{\lambda}$ に対する (5.2) の解である。方程式 (5.2)-(5.5) に対し離散化を行い Newton 法を適用する。時間周期 1 を M 等分、区間 $2L$ を N 等分して、間隔 $\Delta\tau = 1/T$, $\Delta z = 2L/N$ で離散化し、各点 $\tau_k = (k-1)\Delta\tau$ ($1 \leq k \leq M+1$), $z_j = -L + (j-1)\Delta z$ ($1 \leq j \leq N$) に対する U_i, F_i の値をそれぞれ $u_{i,j}^k, f_{i,j}^k$ とおく。特に $u_{i,j}^1, u_{i,j}^{M+1}$ をそれぞれ $u_{i,j}, \varphi_{i,j}$ とおく。このとき (5.2) の時間微分を 1 次精度前進差分で、拡散項、線形移流項に対する空間微分を中心差分近似で陰的スキームを用いる。また、 P_1, P_2 の積分には台形公式を用いて近似すると (5.2)-(5.5) は次のように離散化できる：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{u_{i,j}^{k+1} - u_{i,j}^k}{\Delta\tau} = T \left(d_i \frac{u_{i,j-1}^{k+1} - 2u_{i,j}^{k+1} + u_{i,j+1}^{k+1}}{\Delta z^2} + c \frac{u_{i,j+1}^{k+1} - u_{i,j-1}^{k+1}}{2\Delta z} + f_{i,j}^k \right), \\ u_{i,0}^k = u_{i,N}^k, \quad u_{i,N+1}^k = u_{i,1}^k, \\ H_{i,j} = \varphi_{i,j} - u_{i,j} = 0, \\ P_1 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{M+1} \left(\bar{d}_i \frac{\bar{u}_{i,j-1}^k - 2\bar{u}_{i,j}^k + \bar{u}_{i,j+1}^k}{\Delta z^2} + \bar{c} \frac{\bar{u}_{i,j+1}^k - \bar{u}_{i,j-1}^k}{2\Delta z} + \bar{f}_{i,j}^k \right) u_{i,j}^k = 0, \\ P_2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^N u_{i,j} \bar{u}_{i,j} = 0. \end{array} \right.$$

ただし、 $\sum''$ は初項と末項を $1/2$ 倍かけた数列の和である。ここで $A_{i,j}$ を $A_{(i-1)N+j}$ と置き換え、 $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_{nN})$, $\mathbf{H} = (H_1, \dots, H_{nN})$ を導入すると $nN + 2$ 次元の連立 1 次方程式

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{H}(\mathbf{u}, T, c) = \mathbf{0}, \\ P_1(\mathbf{u}, T, c) = 0, \\ P_2(\mathbf{u}, T, c) = 0 \end{array} \right.$$

が導かれる．この方程式に対し Newton 法を適用して $(\mathbf{u}, T, c)$ を数値的に求める．Newton 法による主な計算は以下のヤコビ行列を構成する部分と連立 1 次方程式の解法である：

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial H}{\partial T} & \frac{\partial H}{\partial c} \\ \frac{\partial P_1}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_1}{\partial T} & \frac{\partial P_1}{\partial c} \\ \frac{\partial P_2}{\partial \mathbf{u}} & \frac{\partial P_2}{\partial T} & \frac{\partial P_2}{\partial c} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta \mathbf{u} \\ \Delta P_1 \\ \Delta P_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H \\ P_1 \\ P_2 \end{pmatrix}. \quad (5.6)$$

我々の数値計算ではヤコビ行列を構成する計算に 1 次精度の前進差分で近似的に求めている．例えば， $H_{\mathbf{u}}$ の計算には

$$\frac{\partial H_i}{\partial u_j} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial u_j} - \delta_{i,j} \approx \frac{\varphi_i(\mathbf{u} + \delta_j, T, c) - \varphi_i(\mathbf{u}, T, c)}{\delta} - \delta_{i,j}, \quad 1 \leq i, j \leq nN$$

と与えている．ただし， δ は小さな値であり， δ_j は nN 次元列ベクトルで j 行目に δ の値をもち他の行は 0 である．また， $\delta_{i,j}$ はクロネッカーのデルタである．この計算は時間刻み幅 $\Delta \tau$ が小さいほどヤコビ行列の構成に時間が掛かるが， $\varphi_i(\mathbf{u} + \delta_j, T, c)$ などの計算は独立して解けるので並列化に向いており高速計算が可能である．また， $H_{\mathbf{u}}$ は密行列となるため (5.6) の解法にはピボット選択ありの LU 分解法を用いた並列化計算で解くことにする．

ここで解説した方法は Single Shooting Method[11] として知られており高次元の常微分方程式系の周期解を求めことは可能であるが，不安定性の強い周期解や周期 T が大きい不安定周期解にはあまり有効な方法ではない．なぜなら，不安定性の強い周期解ほど周期軌道からより離れやすくなるため， $\Phi(1, z; U(0, z), T, c)$ が初期値 $U(0, z)$ の近くに返らなくなり，Newton 法が発散するからである．また，周期 T が大きい不安定周期解の場合にも同じことが言え Newton 法が収束しなくなる．これらの問題点の解決策の 1 つとして Multiple Shooting Method[11] が知られている．

6 双安定反応拡散系に現れる遷移パターンダイナミクス

この節では 2 変数反応拡散系

$$\begin{cases} \varepsilon \tau u_t = \varepsilon^2 u_{xx} + u(1-u)(u-a) - v, \\ v_t = v_{xx} + u - \gamma v \end{cases} \quad (6.1)$$

に対し $a = 0.25$ ， $\gamma = 10.174$ とした双安定反応拡散系に現れる遷移パターンダイナミクスについて考える． $\varepsilon = 0.04$ と固定し， τ をコントロールパラメータとする．このとき (6.1) に対し適当な初期値を与え周期境界条件のもとで時間発展を行うと異なる 4 種類のパル

ス波が現れる (図 2.1). いま, 進行パルス波を初期値にとり τ を $\tau \in [0.04982, 0.04991]$ の範囲で変化させると τ の微小差により遷移パターンの様子が大きく変化する (図 6.1). 本節の目的はこれらの遷移パターンダイナミクスのメカニズムを理解することである. 便宜上, 次のような記号を導入する. SP , TP , SB , TB , TE をそれぞれ定常パルス波, 進行パルス波, 脈動定常パルス波, 脈動進行パルス波, 自明平衡解 $(0,0)$ とおく. 特に, 安定解 (不安定解) であると明記したい場合は記号の最初に $S(U)$ をつける. この記号を用いて図 6.1 の遷移過程をまとめると次のようになる:

- $[P_1]$ $\tau = 0.04982$ の遷移過程 (図 6.1(a)): $TP \rightarrow STB$.
- $[P_2]$ $\tau = 0.04990$ の遷移過程 (図 6.1(b)): $TP \rightarrow TB \rightarrow SB \rightarrow STE$ ⁴.
- $[P_3]$ $\tau = 0.04991$ の遷移過程 (図 6.1(c)): $TP \rightarrow TB \rightarrow SSB$.

これらの遷移過程を理解するために次の 2 つのステップから理解していく:

- **[step1]** 各パルス波に対する安定解と不安定解の存在範囲や出現機構および不安定化を起こす原因の分岐点などを知るためにパルス波の大域的な分岐構造を数値的に求める.
- **[step2]** **[step1]** で求めた不安定パルス波に対し微小な摂動を与え不安定多様体の解の行き先を調べる.

図 6.2 は上記のパラメータによるパルス波の大域的な分岐構造の結果であり次のことがわかった. ただし, 記号 τ_L , τ_R はそれぞれ $\tau_L = 0.0496$, $\tau_R = 0.0544$ の値である.

- 定常パルス波 (SP) の解構造... 定常パルス波は軸対称性を持つ解である. τ が時定数であるため τ を変化しても解の形状は変わらないが, 安定性は変化する. 区間 $\tau_{SPH} < \tau \leq \tau_R$ 上は安定解であり, τ_R から τ の値を小さくすると最初にホップ分岐点 τ_{SPH} で不安定化を起こし, 区間 $\tau_{SPP} < \tau < \tau_{SPH}$ 上では不安定次元数 2 をもつ不安定解となる. さらに, τ の値を小さくするとピッチフォーク分岐点 τ_{SPP} により不安定次元数が変わり区間 $\tau_L \leq \tau < \tau_{SPP}$ 上では不安定次元数 3 をもつ不安定解となる. 分岐点 $\tau = \tau_{SPH}$ から脈動定常パルス波が出現し, 分岐点 $\tau = \tau_{SPP}$ から進行パルス波が出現する.
- 進行パルス波 (TP) の解構造... $\tau = \tau_{SPP}$ から τ の値を小さくすると速度が徐々に速くなり, ホップ分岐点 $\tau = \tau_{TPH}$ により安定性が回復する. 区間 $\tau_{TPH} < \tau < \tau_{SPP}$ 上では不安定次元数 2 をもつ不安定解であり, 区間 $\tau_L \leq \tau < \tau_{TPH}$ 上は安定解となる. 分岐点 $\tau = \tau_{TPH}$ から脈動進行パルス波が出現する.

⁴見かけ上は $TP \rightarrow TB \rightarrow SB \rightarrow STE$ と見えるが, 実は SB と STE の間に USP が関与する.

- 脈動定常パルス波 (SB) の解構造 … $\tau = \tau_{SPH}$ から τ の値を小さくすると振幅が徐々に大きい解なる。この様子はサドル・ノード分岐点 $\tau = \tau_{SBS}$ から τ を大きくしたときにも継続する。区間 $\tau_{SBS} < \tau < \tau_{SPH}$ 上は安定解であり、分岐点 τ_{SBS} により不安定化を起し、区間 $\tau_{SBS} < \tau \leq \tau_{SBH}$ 上では不安定次元数 1 をもつ不安定解となる。 $\tau = \tau_{SBH}$ 上で解の枝は切れているが、これは τ_{SBH} の近くでホモクリニック分岐点によって SB が存在しなくなるためである。
- 脈動進行パルス波 (TB) の解構造 … $\tau = \tau_{TPH}$ から τ の値を大きくすると振幅が徐々に大きい解となる。この様子はサドル・ノード分岐点 $\tau = \tau_{TBS}$ から τ を小さくしたときにも継続する。区間 $\tau_{TPH} < \tau < \tau_{TBS}$ 上は安定解であり、分岐点 τ_{TBS} により不安定化を起し、区間 $\tau_L \leq \tau < \tau_{TBS}$ 上では不安定次元数 1 をもつ不安定解となる。

大域的分岐図を求めた結果、 SB と TB のそれぞれの解構造にサドル・ノード分岐点をもつことが分かる。この分岐点が意味することはサドル・ノード分岐点の近くにパラメータを選ぶとあたかもその解に収束したかのように振る舞うことである。この現象はサドル・ノード分岐点の余韻と呼ばれており [6]、この影響を受けて図 6.1(b) の遷移解は TB や SB の状態を一定時間維持していたと考えられる。しかしながら、 TP が TB へ、 TB が SB へ、 SB が TE に漸近する理由は分岐図の情報から分からない。これらを確認するためにそれぞれの不安定パルス波の不安定多様体がどの解につながっているか行き先を調べることにした。次のような不安定パルス波からの摂動実験を行う。不安定パルス波を S とおき、 S に対する不安定固有値の固有関数を Φ とおく⁵。このとき、初期値 S_{ini} を

$$S_{ini} = S + \delta Re\Phi \quad (6.2)$$

とにおいて時間発展後の解の行き先を調べる。ただし、 δ は小さな定数とする。まずは $\tau_{TPH} < \tau < \tau_{SPP}$ 上の UTP を $S = S_1$ とにおいて不安定多様体の行き先を調べる。 S_1 は不安定次元数 2 の複素共役固有値をもつ。この固有値に対する固有関数を $\Phi = \Phi_1$ とにおいて (6.2) のように初期値をセットする。 $\tau = 0.04985$ にとり S_{ini} から時間発展を行うと δ の符号に無関係に S_{ini} から STB へ落ち着く様子が確かめられる (図 6.3)。ただし、図 6.3 の (a) と (b) の座標系は動座標系 $z = x - ct$ にとり c は S_1 に対する速度である。また、図 6.3 の (a) と (b) のパルス波が右に移動したのは STB の速度が S_1 の速度より速いためである。これより S_1 の近くを通る解軌道は STB へつながるため、遷移パターン [P_1] は TB へ落ち着くことが理解できる。図 6.7(a) はこのときのダイナミクスの模式図で STB が存在する限りこのダイナミクスの構造は大きく変わらない。しかしながら、 $\tau_{TBS} < \tau$ 上では STB が存在しないため TB の近くを通る解軌道はサドル・ノードの余韻を受け TB から離れる。それゆえ、遷移パターン [P_2] は USP から TB へ遷移した後しばらくの間 TB の状態に落ち着いたかのように見える。では、 TB から離れた後の遷移解はどこへ繋がるのか次に見てい

⁵不安定パルス波が周期解の場合は周期解のある位相を S とおく。また、 SP 、 TP に対する不安定固有値は解の周りで線形化した行列の固有値が 0 より大きい固有値に対応し、 SB 、 TB に対する不安定固有値は Monodromy 行列に対する固有値の絶対値が 1 より大きい固有値に対応する。

く、その様子を説明するため分岐図 6.4 を用いる。図 6.4 は $a = 0.25, \varepsilon = 0.04, \tau = 0.0499$ と固定し γ をコントロールパラメータとしたときの分岐図である。 $\gamma = 10.174$ に選ぶと分岐図 6.2 で見たように SB と TB の解は存在しない。 $\gamma = 10.174$ から徐々に γ を大きくすると最初に SB が存在して、その後 TB が存在することが分かる。それゆえ、図 6.2 から γ を大きくすると大雑把に言えば TB の解構造は右へ移動し、 SB の解構造は左へ移動するだろうと推測できる。いま、 $\tau = 0.0499$ 、 $\gamma = 10.177$ と選び図 6.4 の UTB を $S = S_2$ として摂動実験を行う。このとき S_2 は不安定次元数 1 の不安定解であり δ の符号によって解の行き先が異なる。 $\delta < 0$ に選ぶと S_2 から SSB へ、 $\delta > 0$ に選ぶと S_2 から STB へ近づく (図 6.5)。ただし、図 6.5 の (a) と (b) の座標系は動座標系 $z = x - ct$ にとり c は S_2 に対する速度である。そのため、図 6.5(a) のパルス波は左へ移動する。また、図 6.5(b) のパルス波が右に移動したのは STB の速度が S_2 の速度より速いためである。これらの遷移解の行き先を図 6.4 に表すと上 (下) 矢印が $\delta < (>) 0$ に対応する。これより UTB は STB と SSB につながるということが分かる。図 6.7(b) はこのときのダイナミクスの模式図であり、 $\gamma_{TBS} < \gamma \leq 10.178$ 上でこの構造は大きく変わらない。しかしながら、 $\gamma < \gamma_{TBS}$ 上では TB の解構造がサドル・ノード分岐点により消滅するためダイナミクスが変わる。つまり、 TB の近くを通っていた解軌道はしばらく TB の状態を維持した後離れる。一方、 UTB から SSB へ繋がるダイナミクスは大きく変わらない。そのため TB から離れた後の遷移解はこの影響を受け SSB へ落ち着く。この影響が $\gamma = 10.174$ まで引き継いだと考えれば遷移パターン $[P_2]$ は TB から SB へ近づくことが理解できる。しかしながら、 $\gamma = 10.174$ のとき SB が存在しないため $[P_2]$ はサドル・ノードの余韻を受けしばらくの間 SB の状態を維持した後 SB から離れる。一方、遷移パターン $[P_3]$ では TB から SSB へ解の行き先が変化している。これは $\tau = 0.04991$ にとり先程の数値実験と同じ作業を行えば図 6.4 と同じような分岐図が求まり、 $\gamma = 10.174$ で SSB が存在するため解の行き先が変化する。残りは $[P_2]$ の遷移解の SB から ET へのつながりだが、これも同様な摂動実験で説明できる。つまり、図 6.2 に現れる USB を $S = S_3$ とおけば S_3 は不安定次元数 1 の不安定解であり、 δ の符号によって解の行き先が S_3 から ET と S_3 から SSB へつながることが分かる (図 6.6)。数値結果の詳細な説明は省くが USB から ET へ直接つながるのではなく、 USB の遷移の途中で不安定次元数 1 の USP の近くを通るため ET へ近づく (図 6.7(c))。この USP は分岐図 6.2 に現れる USP と異なる解である。

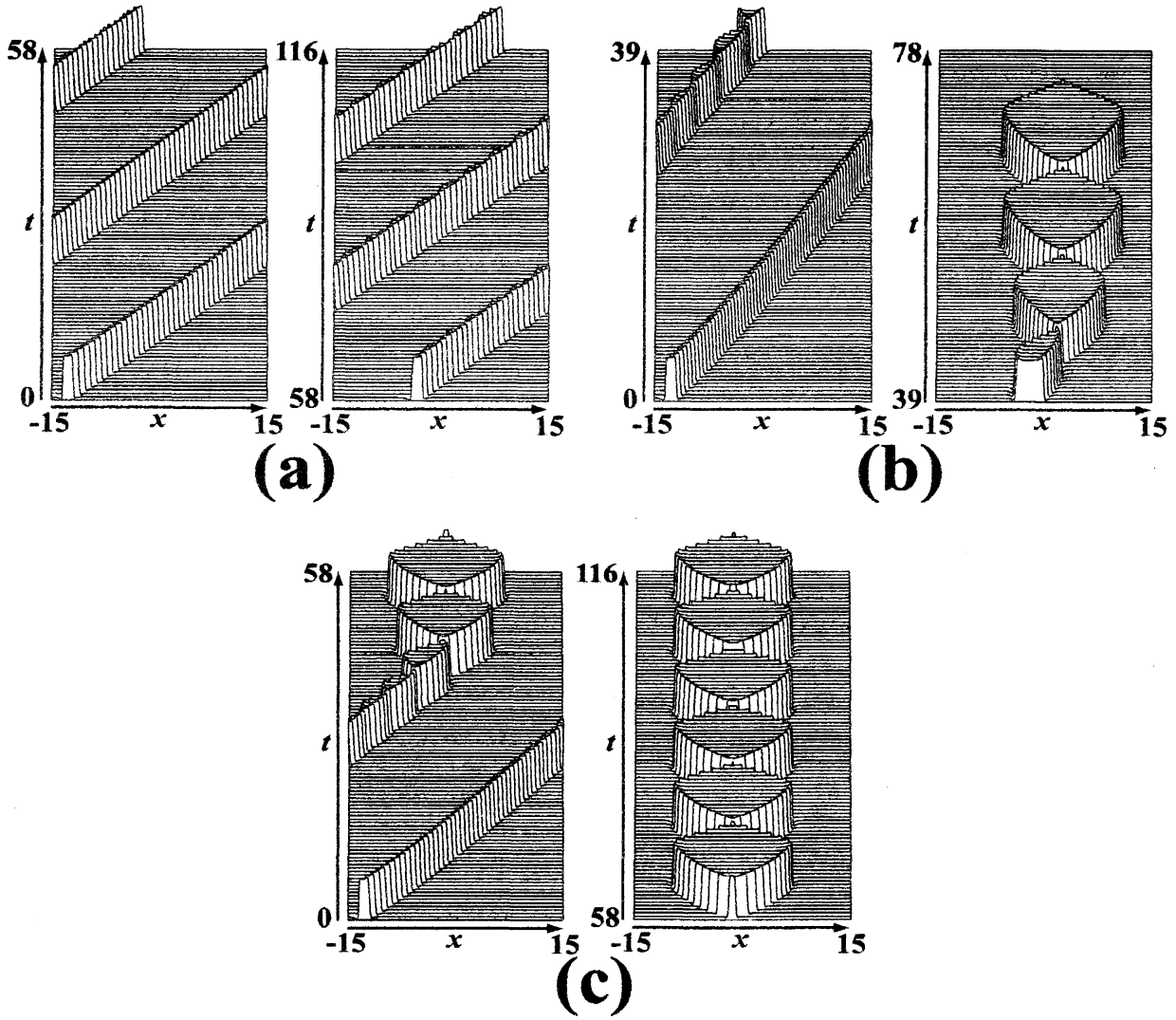


図 6.1: 双安定反応拡散系に現れる遷移パターン. パラメータは $a = 0.25, \varepsilon = 0.04, \gamma = 10.174$ と固定し, τ をコントロールパラメータとして用いる. (a) $\tau = 0.04982$, (b) $\tau = 0.04990$, (c) $\tau = 0.04991$.

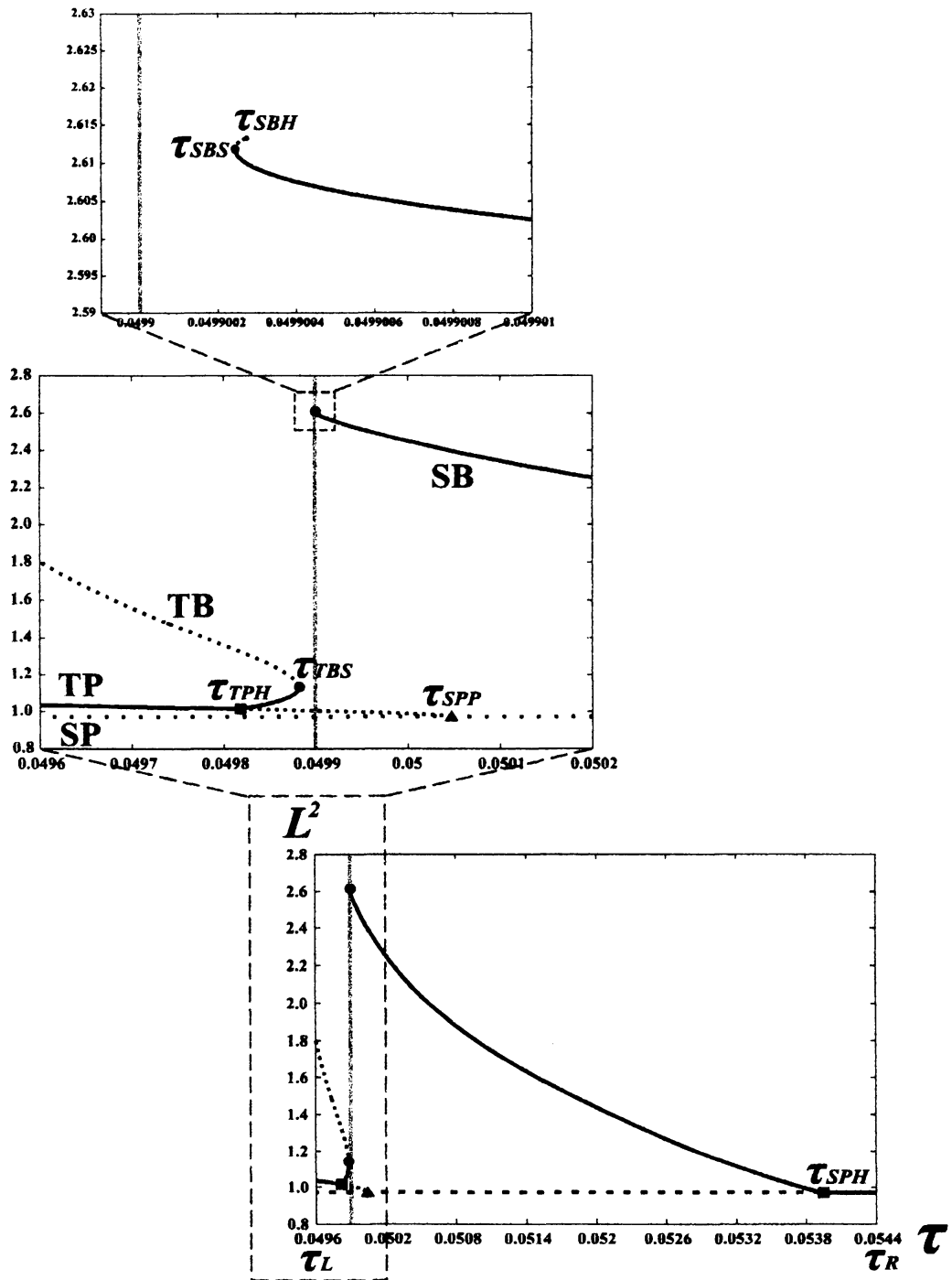


図 6.2: $a = 0.25, \varepsilon = 0.04, \gamma = 10.174$ に対するパルス波の大域的分岐構造. 横軸はコントロールパラメータ τ , 縦軸は u と v の L^2 ノルムの総和である. ただし, SB と TB の場合は 1 周期分の各時刻に対する L^2 ノルムの総和を平均した値である. 実線は安定解, 破線は不安定解である. $\blacktriangle$ はピッチフォーク分岐点, $\blacksquare$ はホップ分岐点である. SP は定常パルス波, TP は進行パルス波, SB は脈動定常パルス波, TB は脈動進行パルス波である.

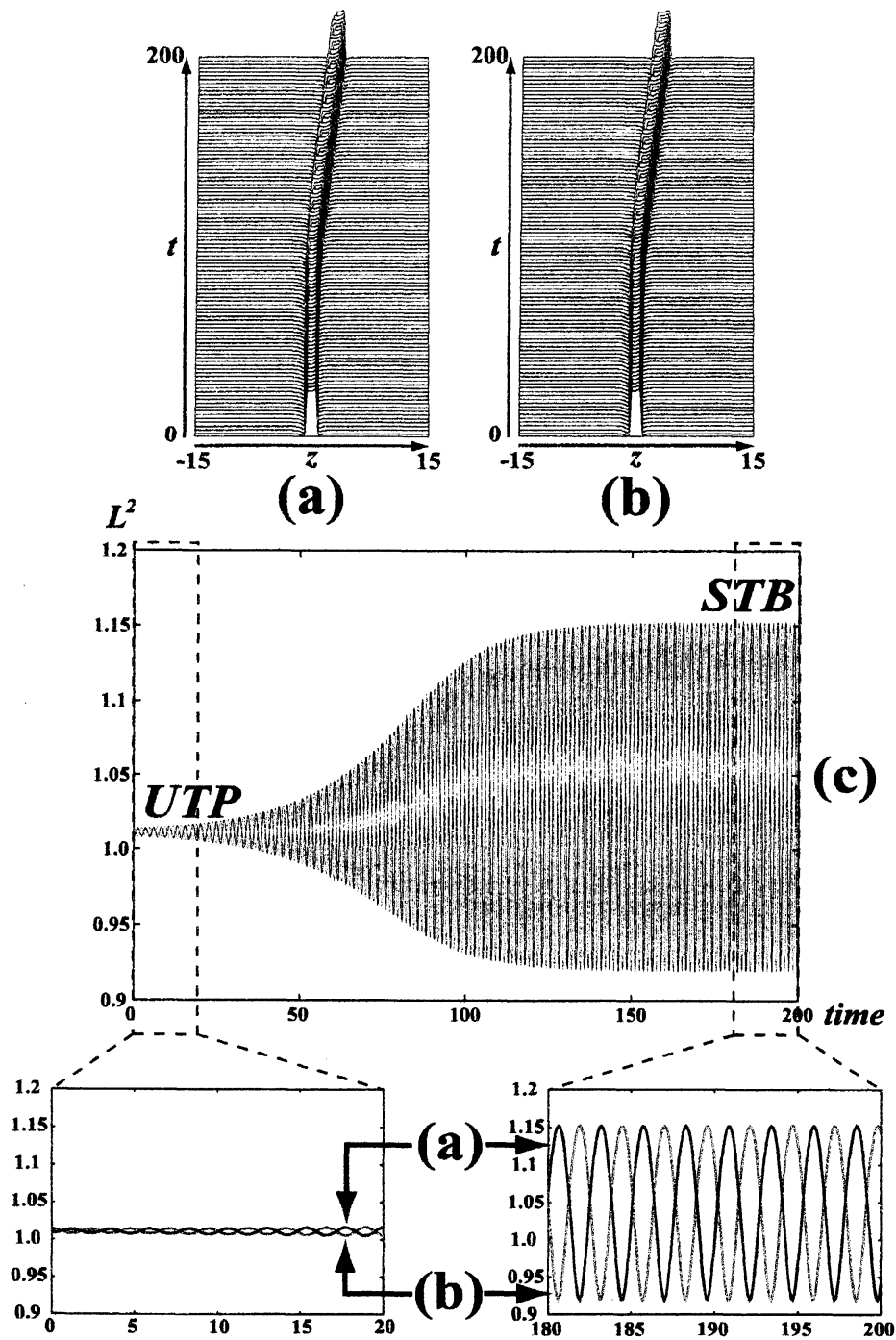


図 6.3: $\tau = 0.04985$ に対する UTP (不安定進行パルス波) から摂動を与えたときに現れる遷移過程. (a) $\delta = -0.01$, (b) $\delta = 0.01$. (c) は (a), (b) の遷移解に対する時間プロット. 横軸は時間, 縦軸は u と v の L^2 ノルムの総和である. ただし, STB は安定脈動進行パルス波である.

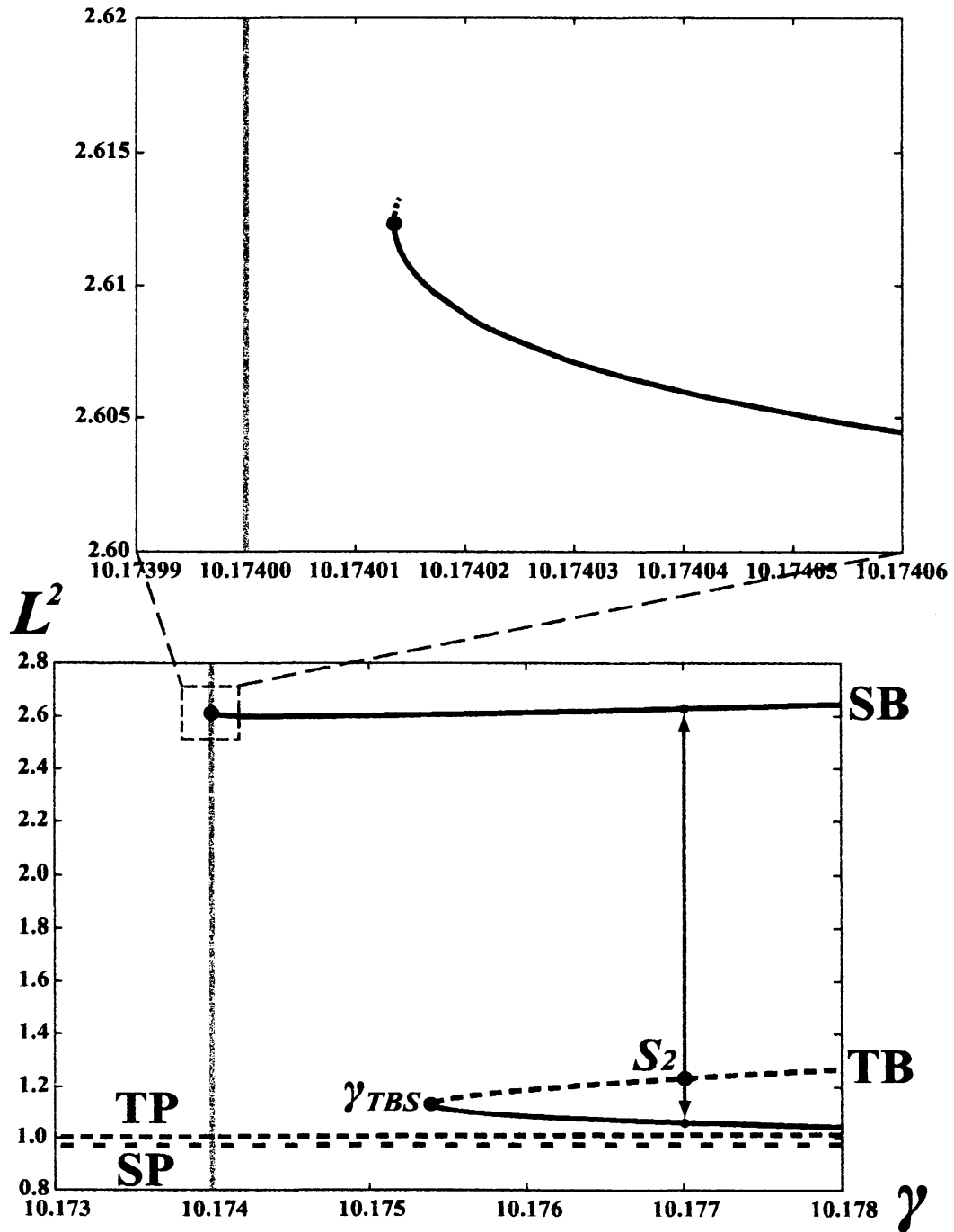


図 6.4: $a = 0.25, \varepsilon = 0.04, \tau = 0.0499$ に対するパルス波の大域的分岐構造. 横軸はコントロールパラメータ γ , 縦軸は u と v の L^2 ノルムの総和である. その他の図中の表記は図 6.2 と同じである.

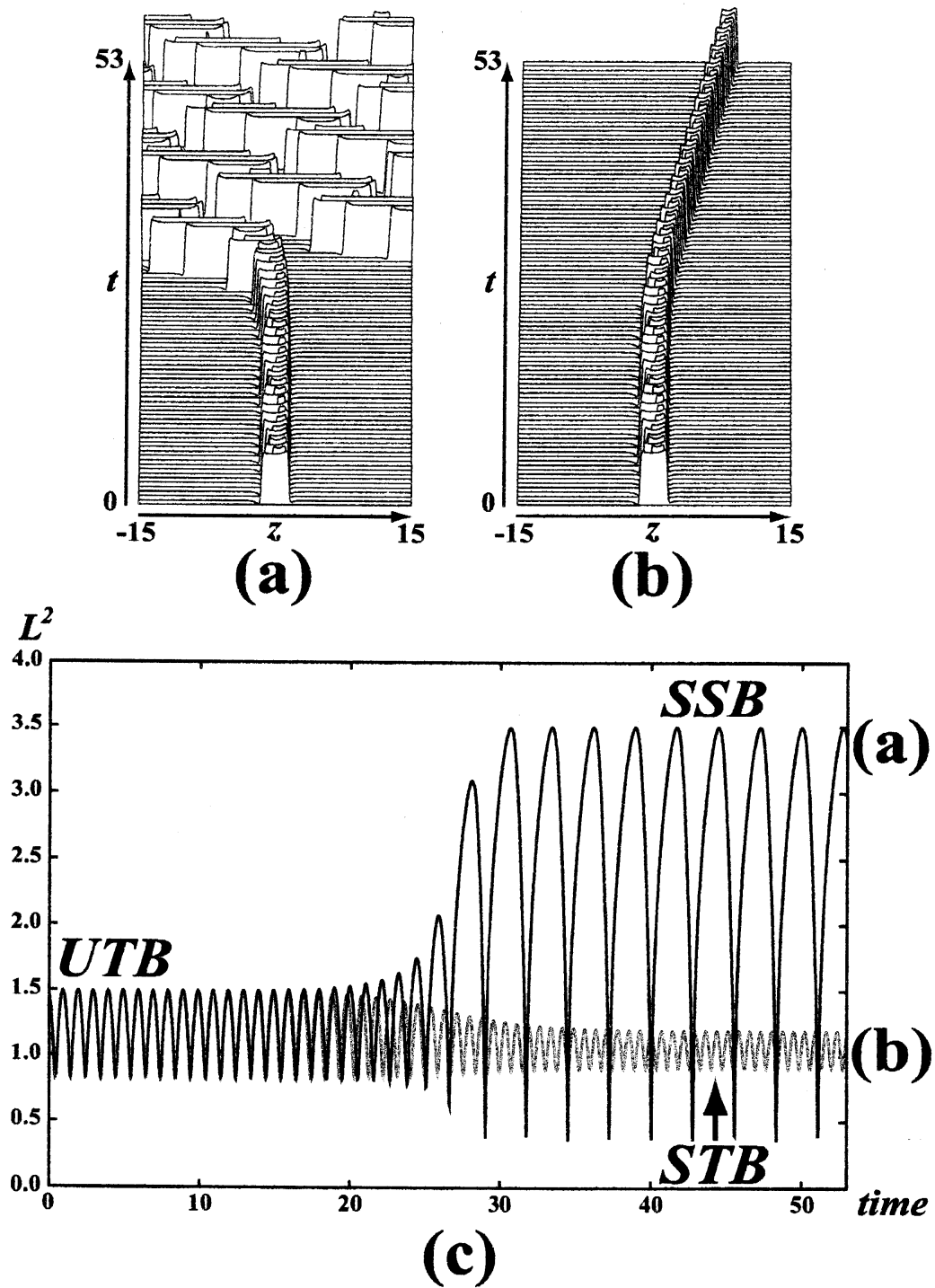


図 6.5: $\tau = 0.0499$, $\gamma = 10.177$ に対する *UTB*(不安定脈動進行パルス波) から摂動を与えたときに現れる遷移過程. (a) $\delta = -0.001$, (b) $\delta = 0.001$. (c) は (a), (b) の遷移解に対する時間プロット. 横軸は時間, 縦軸は u と v の L^2 ノルムの総和である. ただし, *SSB* は安定脈動定常パルス波, *STB* は安定脈動進行パルス波である.

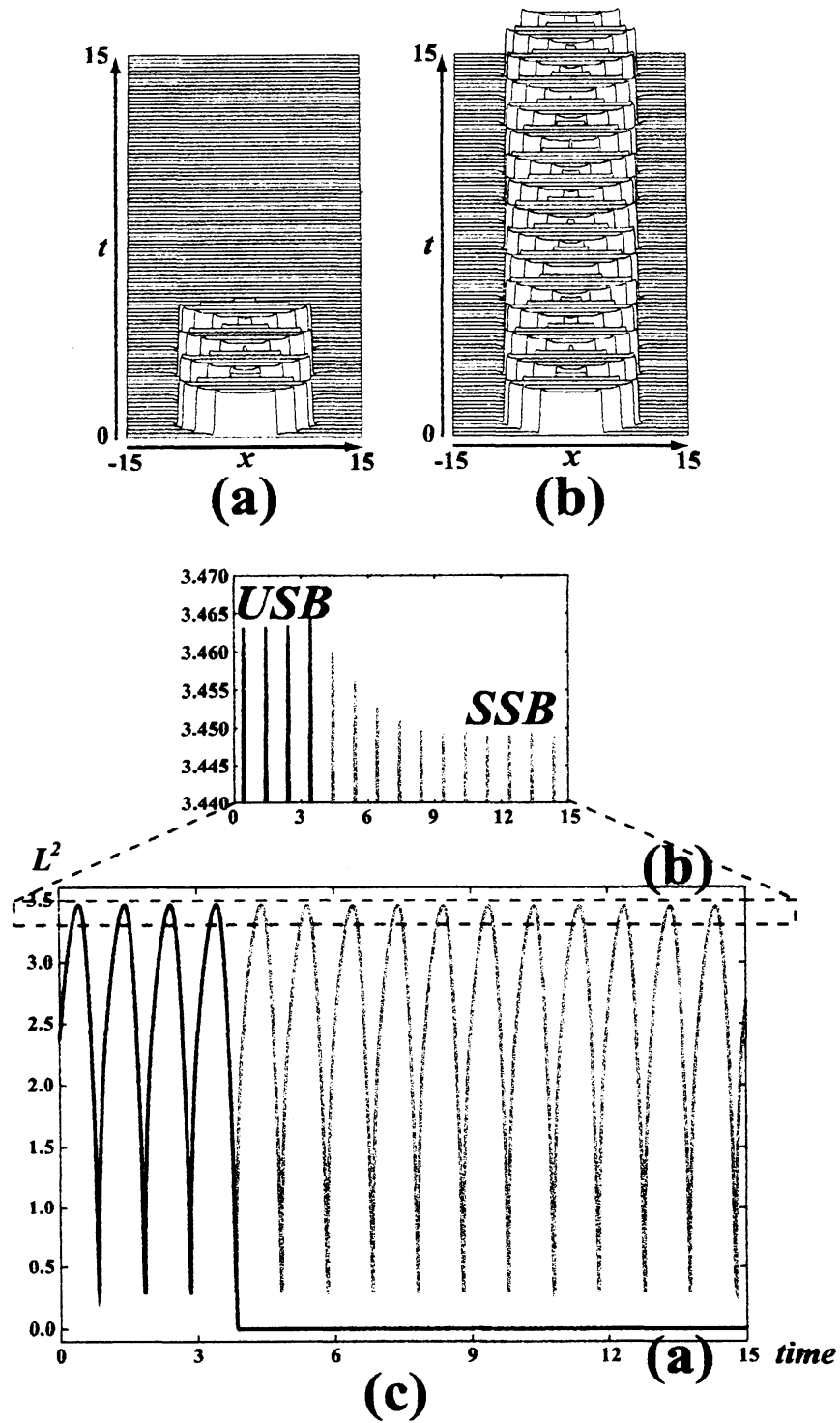


図 6.6: $\tau = 0.04990027795$ に対する USB (不安定脈動定常パルス波) から摂動を与えたときに現れる遷移過程. (a) $\delta = -0.0001$, (b) $\delta = 0.0001$. (c) は (a), (b) の遷移解に対する時間プロット. 横軸は時間, 縦軸は u と v の L^2 ノルムの総和である. ただし, SSB は安定脈動定常パルス波である.

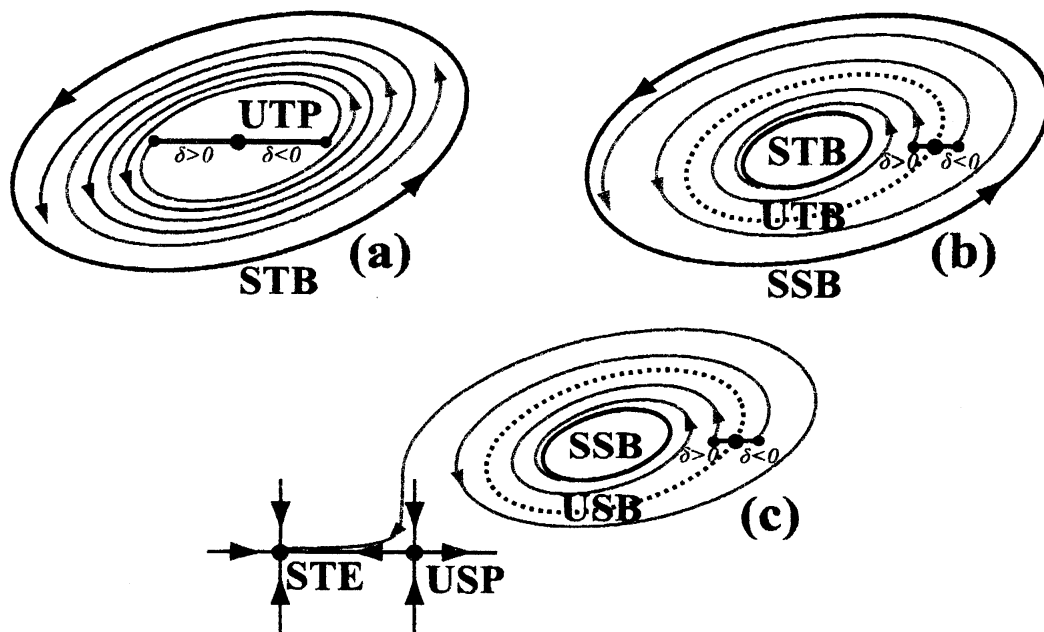


図 6.7: 不安定パルス波 S から摂動を与えたときに現れるダイナミクスの模式図 (a) $S = UTP$ (不安定進行パルス波) からの摂動実験. (b) $S = UTB$ (不安定脈動進行パルス波) からの摂動実験. (c) $S = USB$ (不安定脈動定常パルス波) からの摂動実験. ただし, USP は不安定定常パルス波, SSB は安定脈動定常パルス波, STB は安定脈動進行パルス波, STE は安定自明平衡解 $(0,0)$ である.

7 結論と今後の課題

本研究では双安定反応拡散系に対し TP (進行パルス波) から現れる遷移パターンダイナミクスの理解を行なった。パラメータ τ の変化により TP はホップ分岐の影響を受けて TB (脈動進行パルス波) に遷移したが、 τ の値によっては必ずしも TB に落ち着きつかず、一定時間 TB を維持した後 TB から離れるような遷移パターンが現れた。そのような遷移パターンが現れた理由は TB のサドル・ノード分岐点の余韻を受けたからである。このことは TB の大域的分岐構造を調べた結果理解できたことである。同様に SB (脈動定常パルス波) に関して同じことが言える。 SB が一定時間維持した後 SB から離れる遷移パターンが現れた理由は SB のサドル・ノード分岐点の余韻の影響を受けたからである。これらの TB と SB のサドル・ノード分岐点の余韻を同時に受けるような τ が存在したため TP から複雑な遷移パターンが現れた。また、 TB はサドル・ノード分岐点の余韻を受けた後 SB に遷移したが、この遷移過程を理解するために UTB (不安定脈動進行パルス波) からの不安定多様体の行き先を調べるのが重要となった。同様に SB から TE (自明平衡解 $(0,0)$) へのつながりは USB (不安定脈動定常パルス波) からの不安定多様体の行き先を調べて理解した。このように双安定反応拡散系に現れる遷移パターンダイナミクスを理解するためにはパルス波の大域的分岐構造の情報と不安定パルス波からの不安定多様体の行き先が重要となり、これらの情報なしでは理解できなかった。

本研究では差分スキームを用いて大域的分岐構造を数値的に求めてきたが我々の数値計算法には移流項の計算精度に問題がある。これを改善する方法の1つとしてスペクトル法を用いた計算法が有効であると考えている。しかしながら、 SP (定常パルス波) や TP のような定常解に対しスペクトル選点法を用いた Newton 法を適用するとヤコビ行列 (3.2) に対応する部分が密行列となり差分法よりも計算回数を必要とする。一方、 SB や TB のような周期解の場合は主に時間発展方程式の部分を組み変えることなので連立方程式 (5.6) を解く部分に関しては同じ計算量となるが、ヤコビ行列の構成にはスペクトル法が時間刻み幅を大きくとれる可能性があるため計算量を減らせる可能性がある。これらの数値計算法が確立したとき高精度の TP や TB の大域的分岐構造が数値的に求められると期待している。

また、本論文で紹介した数値計算法は空間 2 次元にも容易に拡張できる。我々は差分スキームを用いて空間 2 次元反応拡散系に現れる定常スポット解、進行スポット解の大域的分岐構造を数値的に求めている。一方、定常スポット解や進行スポット解がホップ分岐により周期的な振る舞いを起こすような解に対しては現在数値的に求められるかどうか検討中であり今後の課題の1つである。当然ながら 2 次元は 1 次元よりも大規模な行列を扱うので安定性解析に必要な固有値計算も大規模となる。そのため固有値計算等の並列化を行うことも今後の課題となる。

参考文献

- [1] A. L. Hodgkin and A. F. Huxley, *A quantitative description of membrane current and its application to conduction and excitation in nerve*, J. Physiol. **117**, 1952, 500–544.
- [2] A.M.Turing, *The chemical basis of morphogenesis*, Phil.Trans.R.Soc.Lond.B **327** (1952) 37–72.
- [3] J.E.Pearson, *Complex patterns in a simple system*, Science **261**, 1993, 189–192.
- [4] M. Mimura and M. Nagayama, *Nonannihilation dynamics in an exothermic reaction-diffusion system with mono-stable excitability*, Chaos, **7**(4), 1997, 817–826.
- [5] P. Gray and S. K. Scott, *Autocatalytic reactions in the isothermal continuous stirred tank reactor*, Chem. Engng. Sci., **38**, 1983, 29–43.
- [6] Y. Nishiura and D. Ueyama, *Spatio-temporal chaos for the Gray-Scott model*, Physica D, **150**, 137–162 (2001).
- [7] H.Ikeda and T.Ikeda, *Bifurcation phenomena from standing pulse solutions in some reaction-diffusion systems*, J.Dynamics and Differential Equations **12**, 2000, 117–167.
- [8] T.Ikeda, H.Ikeda and M.Mimura, *Hopf bifurcation of travelling pulses in some bistable reaction-diffusion systems*, to appear in Methods and Applications of Analysis, **7**, 2000, 165–194.
- [9] E. Doedel, H. B. Keller and J. P. Kernevez, *Numerical analysis and control of bifurcation problems: (I) Bifurcation in finite dimensions*, Internat. J. Bifu. Chaos, **1**(3), 1991, 493–520.
- [10] E. Doedel, H. B. Keller and J. P. Kernevez, *Numerical analysis and control of bifurcation problems: (II) Bifurcation in infinite dimensions*, Internat. J. Bifu. Chaos, **1**(4), 1991, 745–772.
- [11] K.Lust, *Improved Numerical Floquet Multipliers*, Int.J.Bifurcation and Chaos, **11**(9), 2389–2410, 2001.