サドルが紡ぐ縁 -えにし-
精度保証付き数値計算と力学系

松江 要 *

キーワード: 精度保証付き数値計算, サドル, マルチスケールダイナミクス, 爆発解

精度保証付き数値計算が微分方程式, 力学系の諸問題に応用されて久しい. 常微分方程式の時間定常解に始まり, 周期解, フロケ理論, コネクティングオービット, 記号力学系, 分岐などその適用は多岐にわたる. 近年では偏微分方程式 (ill-posed なものも含む), 時間遅れを含む方程式などの無限次元問題にも適用が爆発的に広がっている. 精度保証付き数値計算の微分方程式への応用は解の具体的なプロファイル, 存在や安定性などの性質を導く**定理に基づき, その仮定を計算機により検証する**事を主としているが, その真価の一つとして, **数学解析でも数値計算でも捉えることが一般に困難な対象**[1]**をリーズナブルに計算する**ことが挙げられる. その根源をたどると, (i) : 何かしらの写像の不動点問題に帰着させる, あるいは (ii) : **サドル**型平衡点の検証を出発点にするものが少なくない. 前者は解析的アプローチ, 後者は位相的・幾何学的アプローチでしばしば見受けられる. 著者は後者の立場をとり, サドルを軸として精度保証付き数値計算の力学系への応用を展開してきた. 本稿では, その流れの一端を紹介する. 講演時には, 時間が許す限りさらなる展開も論じる.

1 平衡点・孤立化ブロック

次の一般的な常微分方程式系を考える :

$$x' = f(x,\nu),\quad x\in\mathbb{R}^n,\quad f:\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^k\to\mathbb{R}^n : \text{smooth} \tag{1}$$

ここに, $\nu\in\mathbb{R}^k$ はパラメータである. $\{\varphi^\nu\}_\nu:\mathbb{R}\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^n$ を (1) のなす flow の ν-パラメータ族とする. ν を陽に考察しない場合, $f(x,\nu)$ は単に $f(x)$, φ^ν は単に φ などと書く. 正方行列 A に対して, $\mathrm{Spec}(A)$ を A の固有値全体の集合とする.

定義 1.1. $f(x,\nu)=0$ を満たす点 x を (1) の**平衡点**と呼ぶ. 平衡点 x における f のヤコビ行列 $Df(x)$ が $\mathrm{Spec}(Df(x))\cap i\mathbb{R}=\emptyset$ を満たすとき, x は**双曲型平衡点**という. 双曲型平衡点 x は $\mathrm{Spec}(Df(x))\subset\{\mathrm{Re}\lambda<0\}$ となるとき**シンク**, $\mathrm{Spec}(Df(x))\subset\{\mathrm{Re}\lambda>0\}$ となるとき**ソース**, シンクでもソースでもないものは**サドル**と呼ぶ[2].

位相的アプローチでサドルを考えるときは, サドルの近傍にまで目を向ける.

定義 1.2. コンパクト集合 $B\subset\mathbb{R}^n$ について, $x\in\partial B$ は次を満たすとき (1) の**出口点**という :

$$\exists\epsilon_x>0 \text{ s.t.}, \varphi((0,\epsilon_x),x)\cap B=\emptyset,\quad \varphi((-\epsilon_x,0),x)\cap\partial B=\emptyset$$

*819-0395, 九州大学マス・フォア・インダストリ研究所, カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所 (WPI-I^{2}CNER), kmatsue@imi.kyushu-u.ac.jp

[1]パラメータ摂動に対して不安定な時間依存解はその典型である. Ill-posed な問題の解, マルチスケールダイナミクス, 爆発解もこの部類に入ると言って差し支えないだろう.

[2]複素固有値を有する**フォーカス**との区別もあるが, 本稿ではここまで言及しない.

同様に, $x \in \partial B$ は次を満たすとき**入口点**という：

$$\exists \epsilon_x > 0 \text{ s.t.}, \ \varphi((0,\epsilon_x),x) \subset \mathrm{Int}B, \quad \varphi((-\epsilon_x,0),x) \cap B = \emptyset.$$

出口点全体を B^- と書き, B の**出口**, 入口点全体を B^+ と書き, B の**入口**という. 最後に, B は次を満たすとき (1) の**孤立化ブロック**という：(i) $\partial B = B^- \cup B^+$, (ii) $B^- \subset \partial B$ は閉.

ここで, 本講演の基礎となるサドル周りの孤立化ブロックの精度保証付き数値計算法を論じる. これは [11] に端を発するもので, システマティックに平衡点とその近傍を構成するものである[3]. まずコンパクト集合 $K \subset \mathbb{R}^k$ とその中の 1 点 $\nu_0 \in K$ を固定し, 近似的に (1) の平衡点 x_0 を求めておく. 特に, $f(x_0,\nu_0) \approx 0$ である. ここで, $Df(x_0,\nu_0)$ を $P^{-1}Df(x_0,\nu_0)P \approx \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$ と近似対角化し (generic には可能である), 新しい座標系として $y = P^{-1}(x-x_0)$ を考える. この時, (1) は次のように成分ごとに書ける：

$$\dot{y}_i = \lambda_i y_i + e_i(y,\nu;y_0,\nu_0), \quad i = 1,\cdots,n. \tag{2}$$

ここに, $e = (e_1,\cdots,e_n)^T = P^{-1}(f(x,\nu) - Df(x_0,\nu_0)(x-x_0))$ である. 簡単のために, $\lambda_i \in \mathbb{R}$ とする[4]. いまコンパクト集合 $N \subset \mathbb{R}^n$ を, x_0 がその内部に含まれるようにとり, 各 i に対してある実数 $\delta_i^\pm$ が存在して次を満たすと仮定する[5]：

$$0 \in \{e_i(y,\nu;y_0,\nu_0) \mid x = Py + x_0 \in N, \nu \in K\} \subsetneq [\delta_i^-,\delta_i^+]. \tag{3}$$

この評価を使い, B を以下で定義する：

$$B := \prod_{i=1}^n [b_i^-, b_i^+], \quad [b_i^-,b_i^+] = \begin{cases} \left[-\frac{\delta_i^+}{\lambda_i}, -\frac{\delta_i^-}{\lambda_i}\right] & \text{if } \lambda_i > 0, \\ \left[-\frac{\delta_i^-}{\lambda_i}, -\frac{\delta_i^+}{\lambda_i}\right] & \text{if } \lambda_i < 0. \end{cases} \tag{4}$$

この時, $\lambda_i > 0$ に対応する $B \cap \{b_i = b_i^\pm\}$ は B の出口, $\lambda_i < 0$ に対応する $B \cap \{b_i = b_i^\pm\}$ は B の入口となる. よって, **Conley 指数**や写像度の理論によって以下が示される：

命題 1.3 ([11])**.** *B を上で構築した集合として, $\{x_0\} + PB \subset N$ が成り立つとする*[6]*. この時, $\{x_0\} + PB$ は任意の $\nu \in K$ に対して φ^ν の孤立化ブロックであり, 平衡点のパラメータ族 $\{x_\nu\}_{\nu \in K}$ を含む.*

ニュートン法などと違い, 命題 1.3 は平衡点の存在だけでなく, ∂B のダイナミクスを厳密に与えるという意味で, 力学系の情報をより多く含む方法と言える.

2　サドルから「外の世界」へ

本講演での主役のサドルの精度保証付き数値計算と, その展開例を述べる.

---

[3]元は **Kuramoto-Sivashinsky 方程式**という放物型偏微分方程式においてこの方法が構築された. 有限系に制限することで, (1) の平衡点周りのダイナミクスを精度保証計算する方法としても使える.

[4]複素数の場合は, [11] や [4] に記述がある.

[5]ここが精度保証付き数値計算の真骨頂である. N や K を区間の直積集合として, e_i の $N \times K$ における区間包含をこの段階で計算する. 各 e_i は陽に求めておく. 原理的には, e_i は $x - x_0$ の高次の項しか残っていないため, 区間演算を施しても充分小さな N, K に対して非常に小さい包含を得られる.

[6]包含式 (3) は N での評価として作っていたので, この条件がないと "N における評価" としての意味がなくなる. これが由来で, [11] では本仮定を満たす (4)(あるいはその適切な無限次元版) を **self-consistent a priori bounds** と呼んでいる.

2.1 リャプノフ関数・錐・サドル

まずは, 孤立化ブロック B の中で見つけた平衡点周りの厳密なダイナミクスを記述する. 双曲型平衡点は **Hartman-Grobman の定理**によって, ある小近傍のダイナミクスが線型化ダイナミクスで支配されることが知られているが, 本節の議論は**具体的に与えられた近傍内の**ダイナミクスの情報を与えるという, 精度保証付き数値計算の恩恵を大きく感じられるものとなっている. 簡単のため, 考察を以下の集合に限定する.

定義 2.1 (h-set, cf. [9, 10])**.** 以下の集合・整数・写像を伴うものを (n 次元)*h-set* と呼ぶ:

- コンパクト集合 $N \subset \mathbb{R}^D$.
- 非負整数 $u(N), s(N)$ で, $u(N) + s(N) = n \leq D$ を満たすもの.
- 同相写像 $c_N : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^{u(N)} \times \mathbb{R}^{s(N)}$ で, $c_N(N) = \overline{B_{u(N)}} \times \overline{B_{s(N)}}$ となるもの.

ここで, $\overline{B_k}$ は k 次元単位閉球である. h-set $N = (N, u(N), s(N), c_N)$ に対して, 次の記号を導入する：

$$\begin{aligned}
&N_c := \overline{B_{u(N)}} \times \overline{B_{s(N)}}, \quad N_c^- := \partial\overline{B_{u(N)}} \times \overline{B_{s(N)}}, \quad N_c^+ := \overline{B_{u(N)}} \times \partial\overline{B_{s(N)}}, \\
&N^- := c_N^{-1}(N_c^-), \quad N^+ := c_N^{-1}(N_c^+).
\end{aligned}$$

パラメータ集合 $K \subset \mathbb{R}^k$ を区間集合, B を (4) で作った孤立化ブロックとすると, $B \times K$ は h-set である. ここで, 解の漸近挙動を幾何学的に特徴付ける以下の概念を導入する.

定義 2.2 (リャプノフ関数)**.** 集合 $N \subset \mathbb{R}^n$ 上の ((1) に対する) **リャプノフ関数**を, N の開近傍 U で定義された C^1 関数 $L : U \to \mathbb{R}$ で, $\frac{dL}{dt}(x(t))|_{t=0} \leq 0$ が $x \in N$ を通る任意の解軌道 $\{x(t)\}$ に対して成り立ち, ある $x_* \in N$ で $\frac{dL}{dt}(x(t))|_{t=0} = 0$ となるならば, x_* は (1) の平衡点となるものとする.

定義 2.3 (円盤, [10])**.** $N \subset \mathbb{R}^n$ を h-set とし, $b_u : \overline{B_{u(N)}} \to N$, $b_s : \overline{B_{s(N)}} \to N$ を連続写像, $(b_u)_c = c_N \circ b_u$, $(b_s)_c = c_N \circ b_s$ とする. b_u は次を満たすとき, N 内**水平円盤**という：あるホモトピー $h : [0,1] \times \overline{B_{u(N)}} \to N$ が存在し, $h_s = h(s, \cdot)$ として,

$$\begin{aligned}
&h_0 = (b_u)_c, \quad h_1(x) = (x, 0), \quad \text{for all } x \in \overline{B_{u(N)}}, \\
&h(s, x) \in N_c^-, \quad \text{for all } s \in [0,1] \text{ and } x \in \partial B_{u(N)}.
\end{aligned}$$

同様に, b_s は次を満たすとき, N 内**垂直円盤**という：あるホモトピー $h : [0,1] \times \overline{B_{s(N)}} \to N$ が存在し,

$$\begin{aligned}
&h_0 = (b_s)_c, \quad h_1(x) = (0, x), \quad \text{for all } x \in \overline{B_{s(N)}}, \\
&h(s, x) \in N_c^+, \quad \text{for all } s \in [0,1] \text{ and } x \in \partial B_{s(N)}.
\end{aligned}$$

リャプノフ関数は従来大域的に定義されるものであり (i.e., $N = \mathbb{R}^n$), その存在は勾配系でない限り非自明である. しかし, 平衡点：とくにサドルの周りでは, 非常にシンプルな形でシステマティックにリャプノフ関数を作ることができる. さらに, この条件は平衡点の (不) 安定多様体を構成するのにも役立つ.

命題 2.4 ([6, 10])**.** *N を h-set とし, (1) の平衡点 x_* を含むとする. ある実対称行列 Y が存在して, 次の行列が N* **のすべての点で狭義負値***であると仮定する：*

$$A(x) := Df(x)^T Y + Y Df(x).$$

この時, $L(x) := (x-x_*)^T Y(x-x_*)$ は N 上のリャプノフ関数となる．さらに, x_* が双曲型であるならば[7], 不安定多様体 $W^u(x_*)$ が N 内の水平円盤, 安定多様体 $W^s(x_*)$ が N 内の垂直円盤として与えられる.

これにより, **具体的に与えられた** h-set における解の挙動が安定多様体・リャプノフ関数を通して理解される[8]. よって, 孤立化ブロックの構成法と組み合わせることで, 境界まで込めた N 全体, とくにサドル周りのダイナミクスを精度保証付きで知ることができる．さらに, 上記の安定多様体の特徴づけは正 (負) 不変な「錐」の構成に由来し, サドル近傍のダイナミクスの幾何学的議論に大きく貢献する．しかも, **行列の負値性評価で上記の結果がすべて陽に実現される**ことは特筆すべき点である．ある集合の任意の点における負値性 ($\approx$ 不等式) の評価は, 精度保証付き数値計算の得意技である．また, 1 節の孤立化ブロックをあるパラメータ領域 K 上で作って, $\nu \in K$ まで込めて命題 2.4 にある行列 $A(x,\nu)$ の負値性検証+双曲性検証が成功したとすると, 陰関数定理より **N 内一意双曲型平衡点の $\nu(\in K)$-パラメータ族**を得られる.

2.2 コネクティングオービット

サドルや周期軌道のような力学系の**局所的な**不変集合から, より**大域的な**描像を見るときに典型的な考察の対象となるのが, コネクティングオービットである.

定義 2.5. (1) が平衡点 $p, q \in \mathbb{R}^n$ を持つとする．(1) の解軌道 $\{x(t)\}$ は

$$\lim_{t\to-\infty} x(t) = p, \quad \lim_{t\to+\infty} x(t) = q$$

を満たす時間大域解であるとき, **p と q をつなぐコネクティングオービット**という．特に $p=q$ の時は**ホモクリニック軌道**, $p \neq q$ の時は**ヘテロクリニック軌道**という．p, q は一般の不変集合の時に一般化できる.

位相的アプローチによるコネクティングオービットの検証に使われる道具の中で代表的なものとして, **covering relation** がある.

定義 2.6 (Covering relation, cf. [9, 10])**.** N, M を h-set で, $u(N) = u(M) = u$ なるものとする．$f : N \to \mathbb{R}^{\dim M}$ を連続写像で, $f_c := c_M \circ f \circ c_N^{-1} : N_c \to \mathbb{R}^u \times \mathbb{R}^{\dim s(M)}$ なるものとする．ここで次が満たされるとき, N は M を f-**被覆する** ($N \overset{f}{\Longrightarrow} M$) と言う：

1. 次を満たすホモトピー $h : [0,1] \times N_c \to \mathbb{R}^u \times \mathbb{R}^{s(M)}$ が存在する：

$$h_0 = f_c, \quad h([0,1], N_c^-) \cap M_c = \emptyset, \quad h([0,1], N_c) \cap M_c^+ = \emptyset. \tag{5}$$

ここに, $h_\lambda = h(\lambda, \cdot)$ ($\lambda \in [0,1]$) とする.

2. 連続写像 $A : \mathbb{R}^u \to \mathbb{R}^u$ で次を満たすものが存在する: $p \in \overline{B_u}, q \in \overline{B_s}$ に対して,

$$h_1(p,q) = (A(p), 0), \quad A(\partial B_u) \subset \mathbb{R}^u \setminus \overline{B_u}, \quad \deg(A, \overline{B_u}, 0) \neq 0. \tag{6}$$

以下を命題 2.4 と組み合わせることで, covering relation の言葉でコネクティングオービットを特徴づけられる.

---

[7]これは, **厳密な**ヤコビ行列 $P^{-1}Df(x)P$ に対して Gershgorin の定理を用いることで検証できる.
[8]行列 Y は, 典型的には 1 節の行列 P を用いて $Y = \mathrm{Re}(P^{-H}P^{-1})$ として作られる.

命題 2.7 ([9])**.** $N_i, i = 0,1,\cdots,k$ を *h-set* で $u(N_i) = u$ $(i = 0,1,\cdots,k)$ となるもの, $f_i : N_i \to \mathbb{R}^{\dim(N_{i+1})}$ $(i = 0,1,\cdots,k-1)$ を連続写像とする．さらに, $b : \overline{B_u} \to N_0$ を N_0 内水平円盤, $v : \overline{B_{s(N_k)}} \to N_k$ を N_k 内垂直円盤とする．ここで $N_i \overset{f_i}{\Longrightarrow} N_{i+1}$ $(i = 0,1,\cdots,k-1)$ となるとき, $\tau \in \overline{B_u}$ で次を満たすものが存在する：

$$(f_i \circ f_{i-1} \circ \cdots \circ f_0)(b(\tau)) \in N_{i+1}, \quad \textit{for } i = 0,1,\cdots,k-2,$$
$$(f_{k-1} \circ f_{k-2} \circ \cdots \circ f_0)(b(\tau)) \in v(\overline{B_{s(N_k)}}).$$

2.3 Fast-slow system

多重時間スケールを伴う力学系 : **fast-slow system** を考察する．神経回路・化学反応を記述するモデル, 特異摂動反応拡散系の進行波解が満たす方程式系としても頻繁に登場する：

$$\begin{cases} x' = f(x,y,\epsilon), \\ y' = \epsilon g(x,y,\epsilon), \end{cases} \quad f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n,\ g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R},\ C^r\ (r \geq 1). \tag{7}$$

(7) の興味の一つは, $\epsilon = 0$ とした極限系での特異解軌道が, 十分小さい $\epsilon > 0$ に対して, (7) の時間大域軌道に摂動するかを調べる事にある．通常この手の問題における困難として**異なるスケールのダイナミクスの接合**が挙げられるが, 具体的なモデルに対する (数値) 計算に対しては, **“充分小さい ϵ”と “具体的な ϵ”における結果のギャップを埋めること**も同時に非自明な問題として残る．ここでは Fenichel に始まる幾何学的アプローチ (e.g., [3]) を基礎とする精度保証付き数値計算法を紹介する．特に, **与えられた ϵ_0 に対する任意の $\epsilon \in (0,\epsilon_0]$ で時間大域解の存在を議論する**.

最初のステップは, 平衡点の集まりである critical manifold の摂動で得られる **slow manifold** の構築である．Fenichel 理論により**法双曲性**の仮定の下でその存在が保証されているが, その精度保証計算を考えると, サドルとその周りの (不) 安定多様体の存在検証に帰着されてしまうことがわかる．まず, slow manifold が存在する近傍を作る．Critical manifold に近い点 $(x_0, y_0, 0)$ の周りで (7), 特に f を近似対角化した次の系を考える：

$$a' = Aa + F_1(a,b,y,\epsilon), \quad b' = Bb + F_2(a,b,y,\epsilon), \quad y' = \eta\epsilon_0 g(a,b,y,\epsilon), \quad \eta' = 0. \tag{8}$$

ここに, $\epsilon = \eta\epsilon_0$ とし, $\eta \in [0,1]$, ϵ_0 は定数としている．さらに, 行列 A, B は次を満たすものとする[9]:

$$\mathrm{Re}\lambda \geq \lambda_A > 0, \quad \forall\lambda \in \mathrm{Spec}(A), \quad \mathrm{Re}\mu \leq \mu_B < 0, \quad \forall\lambda \in \mathrm{Spec}(B). \tag{9}$$

遅い変数 y を考えるコンパクト集合 $K \subset \mathbb{R}$ を取り, $K \times [0,\epsilon_0]$ に対して $(7)_{\epsilon=0}$ の孤立化ブロック N を 1 節の方法で構築する．これは $\epsilon > 0$ において孤立化ブロック**ではない**が, $\epsilon > 0$ における速いダイナミクスの特性を記述する．この N を **fast-saddle-type ブロック**と呼ぶことにする.

定理 2.8 (不変多様体定理)**.** N を fast-saddle-type ブロックとし, critical manifold $S_0 = \{y = h(x)\}$ が存在し[10], $N \times [0,\epsilon_0]$ 内で (8) についての**安定 m-錐条件**が成り立つと仮定する．すなわち, $\sigma^m_{\mathbb{A}^s_1} = \sigma^m_{\mathbb{A}^s_1}(z)$, $\sigma^m_{\mathbb{A}^s_2} = \sigma^m_{\mathbb{A}^s_2}(z)$, $\sigma^m_{\mathbb{B}^s_1} = \sigma^m_{\mathbb{B}^s_1}(z)$, $\sigma^m_{\mathbb{B}^s_2} = \sigma^m_{\mathbb{B}^s_2}(z)$, $\sigma^m_{g^s_1} = \sigma^m_{g^s_1}(z)$,

---

[9] 実際の計算では, A, B は (ブロック) 対角化されたものを考えるのが通例である.

[10] 例えば, $\epsilon = 0$ とした (7)：特異極限系における双曲型平衡点の y-パラメータ族により実現される.

$\sigma^m_{g^s_1} = \sigma^m_{g^s_1}(z)$ を $z \in N$ における以下の行列の最大特異値とし,

$$\sigma^m_{\mathbb{A}^s_1} : \mathbb{A}_1(z) = m\left(\frac{\partial F_1}{\partial b}(z)\right) \quad : u \times s\text{-matrix},$$
$$\sigma^m_{\mathbb{A}^s_2} : \mathbb{A}_2(z) = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial a}(z) & \frac{\partial F_1}{\partial y}(z) & \frac{\partial F_1}{\partial \eta}(z) \end{pmatrix} \quad : u \times (u+1+1)\text{-matrix},$$
$$\sigma^m_{\mathbb{B}^s_1} : \mathbb{B}_1(z) = \left(\frac{\partial F_2}{\partial b}(z)\right) \quad : s \times s\text{-matrix},$$
$$\sigma^m_{\mathbb{B}^s_2} : \mathbb{B}_2(z) = m^{-1}\begin{pmatrix} \frac{\partial F_2}{\partial a}(z) & \frac{\partial F_2}{\partial y}(z) & \frac{\partial F_2}{\partial \eta}(z) \end{pmatrix} \quad : s \times (u+1+1)\text{-matrix},$$
$$\sigma^m_{g^s_1} : g_1(z) = m\left(\frac{\partial g}{\partial b}(z)\right) \quad : 1 \times s\text{-matrix},$$
$$\sigma^m_{g^s_2} : g_2(z) = \begin{pmatrix} \eta\frac{\partial g}{\partial a}(z) & \eta\frac{\partial g}{\partial y}(z) & g(z) + \eta\frac{\partial g}{\partial \eta}(z) \end{pmatrix} \quad : 1 \times (u+1+1)\text{-matrix},$$

以下の不等式を仮定する[11]:

$$\mu_B + \left(\sup \sigma^m_{\mathbb{B}^s_1} + \sup \sigma^m_{\mathbb{B}^s_2}\right) < 0, \tag{10}$$
$$\lambda_A - \mu_B - \left\{\sup \sigma^m_{\mathbb{A}^s_1} + \sup \sigma^m_{\mathbb{A}^s_2} + \sup \sigma^m_{\mathbb{B}^s_1} + \sup \sigma^m_{\mathbb{B}^s_2} + \epsilon_0\left(\sup \sigma^m_{g^s_1} + \sup \sigma^m_{g^s_2}\right)\right\} > 0. \tag{11}$$

この時, あるリプシッツ関数 h_u が存在して, $N \times [0, \epsilon_0]$ 内で (8) の局所負不変な集合

$$W^u(S_\epsilon) \cap N = \{(a, b, y, \epsilon) \mid b = h_u(a, y, \epsilon)\}, \quad \epsilon \in [0, \epsilon_0]$$

を得る. h_u のリプシッツ定数は $\leq m$ である. 対応する結果が $W^s(S_\epsilon)$ に対しても成り立ち, $\epsilon \in [0, \epsilon_0]$ に対して $S_\epsilon := W^s(S_\epsilon) \cap W^u(S_\epsilon)$ として, slow manifold を得る.

上の定理は本質的に固有値の優位性が S_ϵ を定める事を示しており, 命題 2.4 と通じる点がある. (7) のコネクティングオービットを考察する際は, 特異摂動により不変集合の構造が劇的に変わるため, **フルスケール**の不変集合と, その (不) 安定多様体の特定が必要となる. それには, S_ϵ 上の**ファイバー束**を同定する次の方法がある.

定理 2.9 (ファイバー錐条件, Fenichel fibering, [3, 4])**.** N を安定 m-錐条件を満たす fast-saddle-type ブロックとし, $\sigma_{1,a}$, $\sigma_{1,b}$, $\sigma_{1,y,\eta}$, $\sigma_{slow,a}$, $\sigma_{slow,b}$, $\sigma_{slow,y,\eta}$ を以下の行列の最大特異値の $N \times [0,1]$ における上限とする:

$$\sigma_{1,a} : \left(\tfrac{\partial F_1}{\partial a}(z)\right), \quad \sigma_{1,b} : \left(\tfrac{\partial F_1}{\partial b}(z)\right), \quad \sigma_{1,y,\eta} : \begin{pmatrix} \tfrac{\partial F_1}{\partial y}(z) & \tfrac{\partial F_1}{\partial \eta}(z) \end{pmatrix},$$
$$\sigma_{slow,a} : \left(\tfrac{\partial g}{\partial a}(z)\right), \quad \sigma_{slow,b} : \left(\tfrac{\partial g}{\partial a}(z)\right), \quad \sigma_{slow,y,\eta} : \begin{pmatrix} \eta\tfrac{\partial g}{\partial y}(z) & g(z) + \eta\tfrac{\partial g}{\partial \eta}(z). \end{pmatrix}$$

ただし, $z = (a, b, y, \eta) \in N \times [0, 1]$. ここで, $L > 0$ に対して以下を仮定する (この時, N は (8) について**不安定ファイバー L-錐条件**を満たすという):

$$\lambda_A > \beta \tag{12}$$
$$\equiv \sigma_{1,a} + m(1 + L^{-2})^{1/2}\sigma_{1,b} + L^{-1}\sigma_{1,y,\eta} + \sigma\left(L\sigma_{slow,a} + m(L^2+1)^{1/2}\sigma_{slow,b} + \sigma_{slow,y,\eta}\right).$$

この時, 任意の $z \in S_\epsilon \cap \mathrm{int}N$ に対してリプシッツ関数 $h^z_{f,u}$ が取れて, 局所的に

$$W^u(z) = \{(a, h_u(a, h^z_{f,u}(a), \epsilon), h^z_{f,u}(a), \epsilon)\} \subset W^u(S_\epsilon)$$

が z を通る (8) の局所不変集合となる. $h^z_{f,u}$ のリプシッツ定数は $m(1 + L^{-2})^{1/2}$ で押さえられる.

[11] ここでは "sup" は $N \times [0, \epsilon_0]$ における上限を意味する.

Slow manifold 上のダイナミクスは, **遅いダイナミクス**として (7) からの縮約により独立して解析が可能であるが, 興味のある (7) の解はほとんどの場合 slow manifold の**上ではなく, 近く**を通る. すなわち, 速いダイナミクスの影響を無視できない. これが**接合問題**の困難さの本質である. さて, 今の場合 slow manifold の近くを通る解をどのように記述すれば良いだろうか？無論, slow manifold の近くを通る解を直接求めるのは正気の沙汰ではない. ここで, **slow manifold の法双曲性**をベースに, slow manifold の近くを通る軌道を covering relation を使って表すことを考える.

定義 2.10 (速い出口, [4])**.** M を $(n+1)$ 次元 h-set で, 同相写像 $c_M : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}^{u(M)+s(M)}$ により次の表示を持つものとする: $M_c = c_M(M) = \overline{B_u} \times \overline{B_s} \times [0,1]$.

ただし, $u = u(M) = 1$, $s(M) = s+1$. ここで h-set M^a は次を満たすとき, M の**速い出口**と呼ぶ事にする：$u(M^a) = 1$, $s(M^a) = s$ で, ある $a \in \partial B_u$ とコンパクト区間 $K_0 \subset (0,1)$ による次を満たす：

$$c_M(M^a) = \{a\} \times \overline{B_s} \times K_0.$$

定義 2.11 (Covering-Exchange, [4])**.** $\epsilon \geq 0$ を固定した (7) を考える. $N \subset \mathbb{R}^{n+1}$ を h-set で $u(N) = 1$ なるもの, $M \subset \mathbb{R}^{n+1}$ を $(n+1)$-次元 h-set で $u(M) = 1$ なるものとする. この時, 以下を満たす h-set の対 (N, M) を (7) の **covering-exchange pair** と呼ぶ:

(CE1) M は次の座標表示を持つ fast-saddle-type block である：

$$M_c = \overline{B_1} \times \overline{B_s} \times [0,1], \quad a \in \overline{B_1}, \quad (b_1, \cdots, b_s) \in \overline{B_s}, \quad y \in [0,1].$$

(CE2) M 内で錐条件が成立する.

(CE3) ある $q \in \{\pm 1\}$ に対して, $q \cdot g(x, y, \epsilon) > 0$ が M 内で成立する.

(CE4) φ_ϵ を (7) の flow として, ある $T > 0$ に対して $N \overset{\varphi_\epsilon(T,\cdot)}{\Longrightarrow} M$ となる.

(CE5) M は次を満たす速い出口 M^a を持つ：

$$c_M(M^a) = \{a\} \times \overline{B_s} \times [y^-, y^+], \quad a \in \partial B_1, \quad [y^-, y^+] \subset (0,1),$$
$$\begin{cases} \sup(\pi_y \varphi_\epsilon(T, N) \cap M) < y^- & \text{if } q = +1 \\ \inf(\pi_y \varphi_\epsilon(T, N) \cap M) > y^+ & \text{if } q = -1 \end{cases}$$

Covering-exchange pair は, 速いダイナミクス, 遅いダイナミクスとそれらが切り替わるところの covering relation の存在を保証する. 実際, ある h-set $\tilde{M} \subset M$ で次を満たすものが存在する:

$$N \overset{\varphi_\epsilon(T,\cdot)}{\Longrightarrow} \tilde{M} \overset{P_\epsilon^M}{\Longrightarrow} M^a.$$

この covering relation は**マルチスケール接合問題の解を自動的に与えてくれる**. しかも, $\epsilon > 0$ に対する (7) の直接の積分は, 本質的に速いダイナミクスに対してのみ要求している. よって, 標準的な精度保証付き数値計算のテクニックのみで covering-exchange pair は構成でき, さらにその (例えば命題 2.7 のような) 列を構成すれば, $\epsilon \in (0, \epsilon_0]$ における時間大域解を精度保証付き数値計算できる.

2.4 爆発解

有限時刻でノルムが発散する (1) の解を**爆発解**といい, ノルムが発散する時刻 $t_{\max}$ を**爆発時刻**という. 解が発散するとそこから解の延長ができなくなるため, 初期値問題の適切性を崩す厄介な対象である. 数値計算でも爆発時刻近くまで計算し, その振る舞いを知る方法が数多く研究されているが, 得られる解が**真の爆発解なのか**, また**真の爆発時刻がいくらか**, その評価は非自明な問題として常に付きまとってくる. これらの情報を知ることは, 微分方程式の爆発解の性質を調べる際の基本的な問題である.

本節では, (1) の爆発解の精度保証付き数値計算を論じる. 慣習として, (1) を "$y' = f(y)$" と書き直す. 特に, y をオリジナルの相変数とする. 幾何学的考察 [5] により, **爆発解もサドルを軸とした漸近挙動の考察により特徴づけられる**ことがわかる. そのために, まずは数値計算による取り扱いが原理的に不可能な "無限" をうまく取り扱えるようにする.

定義 2.12 (許容的擬斉次コンパクト化, [7])**.** 自然数 $\alpha_1, \cdots, \alpha_n$ を固定する. さらに自然数 $\beta_1, \cdots, \beta_n$ を

$$\alpha_1\beta_1 = \alpha_2\beta_2 = \cdots = \alpha_n\beta_n \equiv c \in \mathbb{N} \tag{13}$$

を満たすものとし, 汎関数 $p(y)$ を $p(y) := (y_1^{2\beta_1} + y_2^{2\beta_2} + \cdots + y_n^{2\beta_n})^{1/2c}$ で定義する. ここで, $T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ をある $\kappa : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_{>0}$ に対して

$$T(y) = x, \quad x_i := \frac{y_i}{\kappa(y)^{\alpha_i}}$$

で定義する. この写像 T は次を満たすとき, **型 α の許容的擬斉次コンパクト化**と呼ぶ：

(A0) $\kappa(y) > p(y)$ for all $y \in \mathbb{R}^n$,

(A1) $\kappa(y) \sim p(y)$ as $p(y) \to \infty$,

(A2) $\nabla\kappa(y) = ((\nabla\kappa(y))_1, \cdots, (\nabla\kappa(y))_n)$ は次を満たす：

$$(\nabla\kappa(y))_i \sim \frac{1}{\alpha_i}\frac{y_i^{2\beta_i-1}}{p(y)^{2c-1}} \quad \text{as } p(y) \to \infty.$$

(A3) $y \in \mathbb{R}^n$ に対して $y_\alpha = (\alpha_1 y_1, \cdots, \alpha_n y_n)^T$ とすると, $\langle y_\alpha, \nabla\kappa\rangle < \kappa(y)$.

この T は, $\mathbb{R}^n$ を $\mathcal{D} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p(x) < 1\}$ へ全単射に移すことがわかる. そして, 無限は次の集合の 1 点と対応する：$\mathcal{E} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid p(x) = 1\}$. この集合 $\mathcal{E}$ を**地平線**と呼ぶ.

ここから, f は型 α, 次数 $k+1$ の**無限遠において漸近的擬斉次なベクトル場**とする (e.g., [5, 7]). このとき, 型 α の許容的擬斉次コンパクト化により, **時間スケール特異点解消**

$$\frac{d\tau}{dt} = \kappa(y(t))^k$$

を導入することで, 地平線を含む $\overline{\mathcal{D}}$ 上で連続なベクトル場を作ることができる：

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \tilde{f}_i(x) - \alpha_i\langle\nabla_x\kappa(x), \tilde{f}(x)\rangle x_i \equiv g_i(x). \tag{14}$$

ただし,

$$\tilde{f}_i(x_1, \cdots, x_n) = \kappa^{-(k+\alpha_i)} f_i(\kappa^{\alpha_1}x_1, \cdots, \kappa^{\alpha_n}x_n), \quad i = 1, \cdots, n$$

としている. これにより, (1) の発散する解は, (14) の地平線へ漸近する時間大域解と対応する. さらに, 漸近先がサドルの場合は, 爆発解の一つの特徴づけを与える.

定理 2.13 (定常爆発：概略．[5])**.** *(14)* 右辺の g が $\overline{\mathcal{D}}$ 上で C^1 であると仮定し, $x_* \in \mathcal{E}$ が *(14)* についてサドルであると仮定する．この時, *(1)* の解 $\{y(t)\}$ で, その T による像を τ-スケールで計ったもの $\{x(\tau) = T(y(\tau))\}$ が $W^s(x_*; g)$ に含まれるものは爆発解である[12]．特に, 次数 $k+1$ によって爆発レートが決まる**タイプ I 爆発解**となる．

この定理は, 爆発解の精度保証付き数値計算の一つのガイドラインを与える．特に, (14) の**地平線上のシンクへの時間大域解**を計算すれば, 爆発解を計算できると期待される．

アルゴリズム 2.14 ([7, 8])**.** *(1)* を変換した *(14)* を考える．g は $\overline{\mathcal{D}}$ 上で C^1 と仮定する．

1. *(14)* の平衡点 $x_* \in \mathcal{E}$ を一つ見つける[13]．
2. x_* の $\overline{\mathcal{D}}$ 内の近傍 $\tilde{N}$ を取り, 命題 *2.4* の条件を $\tilde{N}$ で考える．成功した場合, $\epsilon > 0$ を $N \equiv \{x \in \overline{\mathcal{D}} \cap W^s(x_*) \mid L(x) \leq \epsilon^2\} \subset \tilde{N}$ となるものとする．
3. 初期値問題 *(14)* + "$x(0) = x_0$" の解 $\{x(\tau)\}$ で, ある $\tau = \tau_N$ で $x(\tau_N) \in N \cap \mathcal{D}$ となるものを求める．

特に, $L(x)$ 自身が非負になるならば, リャプノフ関数の性質より解 $x(\tau)$ は $\tau \geq \tau_N$ で N の中に留まり続け, $\tau \to \infty$ で x_* に収束する．t-スケールにおける最大存在時刻 $t_{\max}$ は積分

$$t_{\max} - t_N = \int_{\tau_N}^{\infty} \frac{d\tau}{\kappa(T^{-1}(x(\tau)))^k}, \quad t_N = \int_0^{\tau_N} \frac{d\tau}{\kappa(T^{-1}(x(\tau)))^k}$$

により求められる．後者は直接計算, 前者については $\{x(\tau)\}_{\tau \geq \tau_N}$ の性質より, 被積分関数を $L(\leq \epsilon^2)$ を使って評価できる．特に上記の積分は有限確定し, $t_{\max}$ の上限・下限を精度保証付きで計算でき, 爆発解とその爆発時刻の陽な評価が完了する[14].

同様の考察は, 以下のような型 α の**指向的コンパクト化**を用いても同列に実現できる：

$$y_i = \pm\frac{1}{s^{\alpha_i}}, \quad y_j = \frac{x_j}{s^{\alpha_j}} \quad (j \neq i). \tag{15}$$

このとき, $\mathcal{E} = \{s = 0\}$ を地平線と呼び, この集合が無限遠と対応する．このコンパクト化は, $\pm y_i > 0$ でのみ意味を持つ, 局所的なコンパクト化であることに注意する．

2.5 位相的・幾何学的アプローチの真価

本稿で解説していない解析的アプローチとして, Day-Lessard-Mishaikow に端を発する **radii polynomials** (e.g., [1]), ごく近年では Mireles-James らによる, よりシンプルな力学系との位相共役を求める **parameterization method** を用いた精度保証付き数値計算法がある (e.g., [2])．これらの方法は, 元の問題を非線形写像の不動点問題に帰着させることで**元の微分方程式やその力学系が持つ特性を削ぎ落とす**．よって, 適切なバナッハ空間における縮小写像が作れさえすれば話は完結する．そのため, 時間大域解, 方程式の型, 分岐, (不) 安定多様体, ill-posed な PDE の解, 時間遅れ方程式などお構いなしに, 同一のアイデアのもとで検証を実行できる．対して, 著者は Piotr Zgliczyński らの影響を多分に受け[15], 常微分方程式の積分と位相的・幾何学的アプローチを用いて研究を進めてきた．解析的アプローチと

---

[12] 初期データの (大きさや符号などの) 定量的情報は, この定理では必要としない．地平線にある (14) のサドル周りのダイナミクスが, 爆発解ダイナミクスを決定すると言える．

[13] 通常は, x_* での Dg の固有値が (近似的に) 全て実部負になるものを取ってくる．

[14] $t_{\max} - t_N$ が有限確定すればいいので, x_* は $L(x)$ の存在が認められる漸近安定な平衡点であれば充分である．この方法は [6] で提案されたリャプノフ関数による軌道のパラメータ付で, **リャプノフ追跡**と呼んでいる．

[15] 学位を取得して間もない頃, どの方向性で研究を進めればいいか Zgliczyński に相談したところ, ただ一言,**「積分しろ」**と (しかも即答)．この衝撃は今でも忘れられない．

異なり, 位相的・幾何学的アプローチは微分方程式やその力学系が持つ特性をフルに活かす. その最たるものは, 考察の対象の近傍の性質も捉える事だと考える. 直接検証可能な対象 (例えば slow manifold) の近傍にあるものが本質的な場合, 検証できる対象そのものだけを考察しても決して問題は解決できない. 位相的・幾何学的アプローチは対象の近傍のダイナミクスも同時に考察することで, 数学的に考察できる箇所, 真に計算機援用解析が効いてくる箇所の特定により検証を実現する可能性を提示する. 爆発解においても, リャプノフ関数を用いたサドル近傍のダイナミクスの記述がその精度保証計算に大きく貢献している.

謝辞 一連の取り組みは, 文部科学省委託事業『数学協働プログラム』, 九州大学における文部科学省 国立大学改革強化推進補助金, WPI プログラム, JSPS 科研費 (若手 B, JP17K14235) の支援を受けた. この場を借りて厚く御礼申し上げる.

参考文献

[1] S. Day, J-P. Lessard and K. Mischaikow. Validated continuation for equilibria of PDEs. *SIAM J. Num. Anal.*, 45(4):1398–1424, 2007.

[2] J.B. van den Berg, J.D. Mireles-James and C. Reinhardt. Computing (un) stable manifolds with validated error bounds: non-resonant and resonant spectra. *J. Nonlin. Sci.*, 26(4):1055–1095, 2016.

[3] C.K.R.T. Jones. Geometric singular perturbation theory. In *Dynamical systems (Montecatini Terme, 1994)*, volume 1609 of *Lecture Notes in Math.*, pages 44–118. Springer, Berlin, 1995.

[4] K. Matsue. Rigorous numerics for fast-slow systems with one-dimensional slow variable: topological shadowing approach, *arXiv preprint,* arXiv:1507.01462, to appear in *Top. Meth. Nonlin. Anal.*

[5] K. Matsue. On blow-up solutions of differential equations with Poincaré-type compactifications. *arXiv preprint arXiv:1611.06346*, 2016.

[6] K. Matsue, T. Hiwaki, and N. Yamamoto. On the construction of Lyapunov functions with computer assistance. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 319:385–412, 2017.

[7] K. Matsue and A. Takayasu, Numerical validation of blow-up solutions with quasi-homogeneous compactifications, *arXiv preprint,* arXiv:1707.05936

[8] A. Takayasu, K. Matsue, T. Sasaki, K. Tanaka, M. Mizuguchi, and S. Oishi. Numerical validation of blow-up solutions for ordinary differential equations. *J. Comp. Appl. Math.*, 314:10–29, 2017.

[9] D. Wilczak. The existence of Shilnikov homoclinic orbits in the Michelson system: a computer assisted proof. *Found. Comput. Math.*, 6(4):495–535, 2006.

[10] P. Zgliczyński. Covering relations, cone conditions and the stable manifold theorem. *J. Differential Equations*, 246(5):1774–1819, 2009.

[11] P. Zgliczyński and K. Mischaikow. Rigorous numerics for partial differential equations: the Kuramoto-Sivashinsky equation. *Found. Comput. Math.*, 1(3):255–288, 2001.