常微分方程式系の解における複素冪乗発散特異点の数値的探査

石井雅治 *Masaharu ISHII*

Abstract

We study a new numerical detection of singularities with complex-power divergences in solutions of systems of ordinary differential equations. So conventional numerical detections, which are using convergence circles, are slow, we firstly presented a speedy iterative-detection using a complex-norm. However in the iterative detection, it is difficult to determine suitable search-widths when the solution is not periodic.

To solve the difficulty, we present a new iterative-detection which predicts positions of the singularities using second-order differentiations of the solutions. For the singularity with complex-power divergence, its predicted position is accurate because the second-order differentiation is given only by an analytic calculation from current value of the solution not by differences. Accordingly the new iterative-detection gives suitable search-widths, and can perform steady detections. But the new iterative-detection cannot use for detection of the singularities without complex-power divergences.

キーワード：□分岐点　□特異点分布　□数値的解析接続
□特異点の集積　□自然境界　□カオス
□力学系　□複素時間　□冪乗発散特異点

1 はじめに

自励常微分方程式系で表される非線型力学系では，解の特異点の分布が，系の挙動に大きな影響を与え，可積分と非可積分の差異を特徴付けることや，カオス状態と深く相関することが指摘されている．特にカオス的挙動を示す系では，特異点が集積したり自然境界を構成することが，Chang 等による数値実験によって観察されている [1], [2]．また，吉田は，適当な仮定を立てて，フラクタル状の自然境界を解析的に構成している [3]．しかし我々は先の研究で，集積特異点や自然境界が見かけのものに過ぎない可能性を見出した [4]．

従来の研究で利用された，解析接続に頼ったアルゴリズム（Chang と Corliss が作成

した“ATOMCC”[5] が有名である([1] 等で利用)を利用した数値実験では，Riemann 面の葉が適切に設定されているのかが特に明確でない．

我々は Riemann 面の切断の整合性を満たし高精度に特異点位置を探査し得るアルゴリズムの開発を目標として研究を進めてきた．第一に，解の複素ノルムをポテンシャルとした最急速上昇法を開発し [6]，高速かつ高精度に発散特異点を探査し，Riemann 面の切断を明示的に反映することを可能にした．しかし，値が発散しない特異点の探査には適用できない．そこで第二に，発散しない特異点が分岐点であるという性質を利用して，特異点を囲むループを 2 分法で縮小する探査方法を開発した [7].

更にこれらのアルゴリズムや収束円の方法を併用して，実装と実験を繰り返し，実用的なプログラムの開発を続けたところ，解が周期的でない場合，1 ステップの探査幅の設定が極めて難しいという問題が明らかになった．解の特異点の近傍で探査幅が大きいと，特異点を通り過ぎてしまい，探査が収束せず，特異点近傍で複雑で煩瑣な処理が必要になってしまう．特に特異点が集積する場合には，この問題が顕著に現れる．そもそも，適切な探査幅は特異点の位置が明確にならなければ決定できず，しかし特異点の位置が明確であれば逐次探査は必要ないという論理矛盾が存在するのである．

我々はこの問題への方策を研究し，解が複素冪乗発散する場合について，解の 2 階微分を用いて解の特異点の位置を予測し，この予測により安定した探査のできる特異点探査方法を開発した．本方法は，上記の複素ノルムポテンシャル法の一種の改良である．探査方向は解の複素 2 乗ノルムポテンシャルの勾配とし，探査幅を前記の予測位置との差に係数を掛けて決定する．自励常微分方程式系では，解の微分や 2 階微分は，現在時刻の解の関数値のみから解析的に求まるので，上述の差分計算に伴う通り過ぎの問題なしに，特異点の位置を高精度に予測できる．これによって事前に適切な探査幅が得られるのである．

更に，この予測位置を用いることによって，解の発散が，複素冪乗発散であるかそれ以外であるかも探査前に判定できる．本方法ではまずこの判定を行ない，複素冪乗発散する場合にのみ適用を行なう．また，発散の判定には解の関数値に加えその微分値を用いて安定した判定を可能にした．

ただし，log 発散の場合にはより一般的な(それゆえに効率や精度の劣る)別の方法を利用しなければならない．また，何らかの方法によって特異点の概位置をあらかじめ求めておく必要もある．

以下，第 2 章で，上記の特異点の位置探査方法を説明する．第 3 章で，これを用いた特異点探査アルゴリズムの 1 例を示す．

2　2 階微分を用いた解の特異点の位置探査方法

複素冪乗発散する解の特異点の性質を考察し，これに基づいて解の 2 階微分を用い

る特異点位置探査方法を説明する.

複素 n 次元の自励常微分方程式系を次で表す.

(2.1) $$\frac{dx}{dt}=f(x)\quad (x=(x_1,x_2,\dots,x_n),\ f(x)=(f_1(x),f_2(x),\dots,f_n(x))).$$

ここで，時間 t を適当な Riemann 面の特異点を除いた領域上で，x を $\mathbb{C}^n$ 上で考え，$f_i(x)$ を $\mathbb{C}^n$ 上の有理型関数とする．以下では，(2.1) の解の $x_i(t)$ 成分が，$t\to t_*$ のとき複素冪乗発散する(孤立)特異点を持つとする．ここで“複素冪乗発散”とは，t_* の十分近傍における $x_i(t)$ の挙動が,

(2.2) $$x_i(t)\approx a(t-t_*)^{\rho}\quad (a,\rho\in\mathbb{C},\ \mathrm{Re}(\rho)<0)$$

で表されることをいう．偏角を一定範囲に制限すれば，$x_i(t)$ は $t\to t_*$ のとき発散することは明らか($t=t_*$ は分岐点であってもよい).

複素 2 乗ノルムポテンシャル法 [6] によって，複素冪乗発散する特異点を探査することができる．しかし，ポテンシャルの勾配は，ポテンシャルの増大方向のみを示すから，その方向に向けて 1 ステップに進めるべき適切な複素時間の幅，すなわち探査幅 $d\ (\in\mathbb{R})$ を決める情報は得られない.

幾つかの系で実験してみると，勾配流のベイズン(流域)の大きさが事前に予測できないので，k−ステップでの時刻 t_k がベイズンに入っていたとしても，d が過剰になって $k+1$−ステップで t_{k+1} は特異点を通り過ぎてしまうという現象がしばしば発生した．通り過ぎが発生する場合には，停止条件の設定もクリティカルになる．或る値以上を発散と定義しても，通常，発散域はベイズンのさらに部分集合となり，d が大きければ，1 ステップで発散域を通り超えてしまい，探査がある程度上手く行く場合であっても，特異点の回りで振動が発生する．そもそも，適切な探査幅は特異点の位置が明確にならなければ決定できず，逆に特異点の位置が明確であれば逐次探査は必要ないという論理的矛盾が存在するのである．特に，特異点分布が周期的でなく，集積的な場合には，このような現象が顕著に現れる.

しかしもし，発散が (2.2) の形に限定できれば，その近似が有効な範囲で，$dx(t)/dt$, $d^2x(t)/dt^2$ を利用して t_* を求めることができる．以下，記載の簡単のため複素時間微分を $\dot{x}_i$ で表記する．またまずは，厳密に $x_i(t)=a(t-t_*)^{\rho}$ が成り立つとして取扱うが，後に近似精度等の限界を論じる．いま,

$$\dot{x}_i(t)=\rho a(t-t_*)^{\rho-1},\quad \ddot{x}_i(t)=\rho(\rho-1)a(t-t_*)^{\rho-2}$$

なので，$x,\dot{x},\ddot{x}$ から a,ρ を消去して，$x_i(t)$ の特異点の位置を次で表すことができる.

(2.3) $$t_*=t-h(x),\quad h(x):=\frac{x(t)_i\,\dot{x}_i(t)}{\dot{x}_i(t)^2-x_i(t)\,\ddot{x}_i(t)}\ (=t-t_*).$$

ここで，h が x のみの関数であることは，(2.1) と次が成り立つことによる．

(2.4) $$\ddot{x}_i = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} f_j(x)$$

よって，$\partial f_i(x)/\partial x_j$ を事前に解析的に計算してプログラミングしておけば，(2.3) の t_* は，現在の x の値と現在時刻 t の値のみから，四則演算の高い精度で計算できる．すなわち，上述の差分計算に伴う通り過ぎの問題なしに，特異点の予測位置が高精度に求められるのである．

上の h に基づいて，1 ステップの差分時間 $\Delta t\,(\in \mathbb{C})$ を更新するのが，以下に示す特異点位置探査方法（以下，“本方法” という）である．ただし，h を，現在時刻と特異点位置との差として直接利用することは原理的に不可能である．(2.3) の計算は (2.2) が近似式であることを無視しているし，そもそも解が，log 発散する等して，複素冪乗発散しない場合もあり得るからである．実際，$x_i(t)$ の，t_* の十分近傍における挙動が，

$$x_i(t) \approx a \log(t-t_*)^{\rho} \quad (a, \rho \in \mathbb{C},\ \mathrm{Re}(\rho) < 0)$$

で表される場合，次が成り立つ．

(2.5) $$(t-t_*)\log(t-t_*) \approx h(x).$$

この場合，h は，特異点位置との差を表さず，探査方向を与えないことは明らかである．

本方法では，逆にこのことを利用して，まず解が複素冪乗発散しているのかを判定する．複素ノルムポテンシャル法で得られる勾配方向を，大きさ 1 の複素数 e で表したとき，$\arg e$ と $\arg h$ が近ければ，複素冪乗発散していると判定する．

解が複素冪乗発散している場合には，探査方向を e で，探査幅 $d\,(\in \mathbb{R})$ を

$$d = \alpha\,|\,h\,| \quad (0 < \alpha < 1)$$

で定める．すなわち，$\Delta t = d\,e$ とするのである．α は，d が数値積分法の精度から要請される差分幅を越えないように決める．あるいは，2 階微分の計算回数を減らすために，数値積分のステップごとには t_* を更新せず，何ステップかに 1 回のみ更新してもよい．(2.2) の近似精度は，t が特異点に近づくほど増大するから，t_* の予測精度はステップが進む度に増大する．

また，t が特異点に近づけば，h は定義上 0 に近づく．従って，h を探査の終了判定の一部に利用できる．なお log 発散の場合であっても，(2.5) より h は 0 に近づく．

解の発散の判定には，$|\,x(t)\,|$ そのものではなく，$v := |\,\dot{x}(t)\,/\,x(t)\,|$ を用いる．v は，複素冪乗発散の場合，特異点の近傍でほぼ $|\,\rho\,||\,t-t_*\,|^{-1}$ となる．すなわち，v は係数 a の影響を受けず，発散の速度も常に -1 次であるから，これによって安定した判定

ができるのである．なお log 発散の場合であっても，v は $|\rho||t-t_*|^{-1}|\log(t-t_*)|^{-1}$ 程度となり，評価に利用できる．

以上から，冪乗発散の場合，探査の完了条件は，$|h|$が所定値 $h_{\max}$ 以下になりかつ v が $\beta h_{\max}^{-1}$ $(0<\beta<1)$ 以上になること，と定めるのが合理的であることがわかる．

なお，本方法は，(2.2) の近似が有効である限度でしか利用できない．log 発散の場合にはより一般的な（それゆえに効率や精度の劣る）別のアルゴリズムを利用しなければならない．また，本方法は，収束円の方法を利用する等して，特異点の概位置をあらかじめ求めておき，その後段として利用する必要がある．本方法単独で全ての特異点を決定できる訳ではないことに注意されたい．

3 アルゴリズム

ここでは，前章で説明した特異点探査方法を，コンピュータアルゴリズムとして，ステップに分けて現す．以下，複素時間微分を $\dot{x}$ で表記する．特に断りのない変数や定数は複素数とする．なお，以下のアルゴリズムとしての例示は，その原理を明確にするためのものであり，複雑になる高速化処理等は省略する．また，探査完了の判定も最適なものにはなっていない．

算法3.1

Step 1: 初期時刻を t_0，初期点を $x^{(0)}$ とする．解の全ての成分について，t_0 を中心とした収束半径を計算し，それが最小である成分の添え字を i とする．（この i は，全てを走る添え字を表す訳ではないことに注意．）

Step 2: 収束円を用いる等，Step3 以下とは異なるアルゴリズムによって，$x_i(t)$ の特異点に近づくよう，(2.1) を $t_0, x^{(0)}$ から時間推進させる．推進後の時刻を t_1 とし，得られた点を $x^{(1)}$ とする．$t_1, x^{(1)}$ が，この異なるアルゴリズムの発散条件を満たすとき，t_1 を $x_i(t)$ の特異点として探査を完了する．そうでないとき，次の Step に進む．

Step 3: (2.1) と (2.4) より，$x^{(1)}$ から $\dot{x}(t_1), \ddot{x}(t_1)$ を求め, 次を計算する．ここで，h は予測特異点との時間差であり，$\tilde{e}$ は複素 2 乗ノルムポテンシャルの勾配である．

$$\tilde{e} := \left.\frac{\partial |x_i(\alpha+\sqrt{-1}\beta)|^2}{\partial \alpha}\right|_{\alpha+\sqrt{-1}\beta=t_1} + \sqrt{-1}\left.\frac{\partial |x_i(\alpha+\sqrt{-1}\beta)|^2}{\partial \beta}\right|_{\alpha+\sqrt{-1}\beta=t_1} \quad (\alpha,\beta\in\mathbb{R}),$$

$$e := \frac{\tilde{e}}{|\tilde{e}|}, \quad h := \frac{x_i(t_1)\dot{x}_i(t_1)}{\dot{x}_i(t_1)^2 - x_i(t_1)\ddot{x}_i(t_1)}.$$

Step 4: 探査方向誤差の許容値を $\delta_{\max}$ $(\in\mathbb{R}_+)$ とする．

$$\delta := \left| e - \frac{h}{|h|} \right| \ (\approx |\arg e - \arg h|)$$

とおき，$\delta < \delta_{\max}$ が成り立つとき，解が複素冪乗発散していると判定し次の Step に進む．そうでないとき，$t_0 := t_1$，$x^{(0)} := x^{(1)}$ として Step2 に戻る．

Step 5:　数値積分で基本設定されている時間差分幅を $\tilde{d}\,(\in \mathbb{R}_+)$ とする．$\tilde{d} < |h|/2$ のとき，探査幅 $d\ (\in \mathbb{R}_+)$ を $\tilde{d}$ とし，そうでないとき $d := |h|/2$ とし，差分時間 $\Delta t\,(\in \mathbb{C})$ を de とする．

Step 6:　t_1 を初期時刻，$x^{(1)}$ を初期点として，時間 Δt だけ (2.1) を数値積分する．数値積分後の時刻 t_2 を $t_1 + \Delta t$ とし，得られた点を $x^{(2)}$ とする．

注：Δt がステップごとに変化するので，数値積分に多段法は利用できない．1 段法の数値解法，例えば高次の古典 Runge-Kutta 法等を利用する必要がある．

Step 7:　Step3 と同様にして，$x^{(2)}$ から $\dot{x}(t_2)$, $\ddot{x}(t_2)$ を求め，t_2 における e, h を計算する．

Step 8:　Step4 と同様に，δ を計算し，$\delta < \delta_{\max}$ が成り立つとき，次の Step に進む．そうでないとき，$t_0 := t_2$，$x^{(0)} := x^{(2)}$ として Step2 に戻る．

Step 9:　特異点の位置誤差の許容値を $h_{\max}\,(\in \mathbb{R})$ とする．$v := |\dot{x}(t_2)/x(t_2)|$ とおき，

$$h < h_{\max},\quad v > 0.01\,h_{\max}^{-1},$$

の両者が成り立つとき，t_2 を $x_i(t)$ の特異点として探査を完了する．一方でも成り立たないとき，$t_1 := t_2$，$x^{(1)} := x^{(2)}$ として Step5 に戻る．

4 まとめ

自励常微分方程式系のカオス的挙動を複素時間において解析するには，Riemann 面の葉を適切に設定した上で，解の特異点の位置を高精度に求めるプログラムが必要不可欠である．我々はこれらの条件を満たすアルゴリズムの開発を目標として研究を進めてきた．

第一に，解の複素ノルムをポテンシャルとした最急速上昇法を開発した [6]．しかし，この方法は値が発散しない特異点の探査には適用できなかった．そこで第二に，値が発散しない特異点が分岐点であるという性質を利用して，特異点を囲むループを 2 分法で縮小する探査方法を開発した [7]．これらによって，精度や速度の向上，Riemann 面の切断の反映等が可能となった．

しかし [6] の方法では，解が周期的でない場合，1 ステップの探査幅の設定が極めて難しいという問題が明らかになった．我々はこの問題への方策を研究し，解が複素

冪乗発散する場合に，解の 2 階微分を用いて解の特異点の位置を到達前に予測し，この予測により安定した探査を行なう特異点探査方法を開発した．この方法は，上記の複素ノルムポテンシャル法の一種の改良であり，次の処理から成る．

(i) 前処理として，解の成分であって，初期点の時刻に特異点の時刻が最も近いものを選ぶ．そして，解をその成分の特異点の近傍まで時間発展させておく．

(ii) 現在時刻を t とする． $x(t)$ から $\dot{x}(t), \ddot{x}(t)$ を求め, これらから予想特異点位置との時間差 h と複素 2 乗ノルムポテンシャルの勾配 $grad\,|x(\alpha+\sqrt{-1}\beta)|^2\Big|_{\alpha+\sqrt{-1}\beta=t}$ を計算し，勾配を単位化して複素平面における探査方向 e とする． h と e の方向の差が所定値より小さいときは，解が複素冪乗発散していると判定して次へ進む．そうでないときは異なる方法での探査に切り替える．

(iii) 差分時間 Δt の方向を e とし，大きさを h から定め，解を Δt だけ時間発展させる．

(iv) (ii) と同様にして，時刻 $t+\Delta t$ における h と e を計算し，h と e の方向の差が所定値より小さいときは次へ進む．そうでないときは異なる方法での探査に切り替える．

(v) h が所定値より小さくかつ $|\dot{x}(t+\Delta t)/x(t+\Delta t)|$ が所定値より大きいときは，$t+\Delta t$ を特異点として探査を完了する．そうでないときは，$t := t+\Delta t$ として (ii) に戻る．

上の (ii) において，解の微分や 2 階微分は，現在時刻の解の関数値のみから解析的に求まるので，予想位置との時間差 h が高精度に計算できる．これを利用して適切な探査幅を得る点が本方法の最大の特徴である．従来の複素ノルムをポテンシャル法では，固定した差分幅によって特異点を通過してしまうという現象がしばしば生じ，1 ステップの探査幅の設定が極めて難しかった．しかし本方法によって，解が複素冪乗発散する場合について，この問題がほぼ解消された．

h と複素ノルムポテンシャルの勾配を比較することによって，解の発散が，複素冪乗発散であるかそれ以外であるかが，事前に判定可能であり，これを上の (ii) と (iv) で行なっている．上の (v) では，解の発散の判定に，$|x(t+\Delta t)|$ そのものではなく，$|\dot{x}(t+\Delta t)/x(t+\Delta t)|$ を用いる．この発散の速度は常に -1 次なので，安定した判定が可能である．

なお，本方法は，log 発散の場合には利用できない．また，収束円の方法を利用する等して，特異点の概位置をあらかじめ求めておき，その後段として利用する必要がある．今後の課題として，log 発散の場合に利用できる特異点探査方法の開発が必要不可欠である．また，特異点のベイズンを効率的に区分する方法も必要である．

謝辞

本稿の研究において，平田吉博氏に，大変な手間のかかるコンピュータプログラムへの実装作業を行っていただいた．ここに，深く感謝の意を表明いたします．

参考文献

[1] Y. F. Chang, M. Tabor and J. Weiss, “Analytic Structure of the Henon-Heiles Hamiltonian in Integrable and Nonintegrable Regimes”, J. Math. Phys. 23 (4), (1982), pp. 531−538.

[2] Y. F. Chang, J. M. Greene, M. Tabor and J. Weiss, “The Analytic Structure of Dynamical Systems and Self-Similar Natural Boundaries”, Physica 8D, (1983), pp.183−207.

[3] Haruo Yoshida, “Self-Similar Natural Boundaries of Non-Integrable Dynamical Systems in the Complex t Plane”, Chaos and Statistical Methods, Springer-Verlag (1984), pp.42−45.

[4] 石井雅治, “カオス系の解における特異点分布とみかけの自然境界”, 社会とマネジメント 6 (2), (2009), pp.1−12.

[5] Y. F. Chang, G. F. Corliss, “Ratio-like and Recurrence Relation Tests for Convergence of Series”, J. Inst. Math. Appl. 25 (4), (1980), pp.349−359.

[6] 石井雅治, “常微分方程式系の解における無限大に収束する特異点の数値的探査”, 社会とマネジメント 8 (2), (2011), pp.1−14.

[7] 石井雅治, “常微分方程式系の解における有限値を持つ特異点の数値的探査”, 社会とマネジメント 10 (1), (2012), pp.1−9.

石井　雅治（いしい　まさはる）

1963年　福岡県生まれ

所　属・現　職	椙山女学園大学現代マネジメント学部現代マネジメント学科・教授
最終学歴・学位	名古屋大学大学院理学研究科博士課程後期課程物理学専攻修了・博士（理学）
所　属　学　会	日本応用数理学会，日本物理学会，情報処理学会，電子情報通信学会
主　要　業　績	「2冪剰余環の既約剰余類群の構造の暗号への応用」（共著者：吉本明宣）『日本応用数理学会論文誌』19（1）（2009），日本応用数理学会，pp.57−71. 「ニューロ多様体の正則領域における勾配流の構造」，『日本応用数理学会論文誌』19（2）（2009），日本応用数理学会，pp.143−157. 「有限分岐解を持つ自励常微分方程式系」，『社会とマネジメント』8（1）（2010），椙山女学園大学現代マネジメント学部，pp.15−32.