

フロンティア数理物質科学II レポート課題1

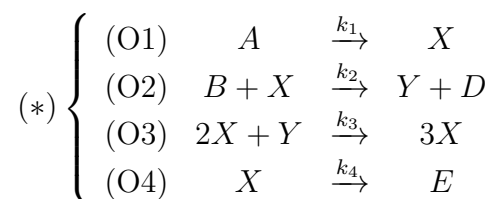
- 締め切り：
2017年5月17日(水) 17:00 必着
- 提出先：
講義開始前に直接提出，またはリーディング事務局レポートボックス
リーディング事務局宛での学内便で送ってもよい。
宛名：⑨ 7号館化学部門支援室内 リーディングプログラム事務局
- 様式：
A4サイズのレポート用紙．両面使ってよい．
科目名・名前・LP-ID・提出日を記入した表紙をつけること．
レポート用紙の左上をホッチキスでとめること．
使用言語は日本語または英語とする．

(注意事項)

レポート課題でわからない問題については担当教員まで質問に来てもよいし，学生間で相談して取り組んでもよい．

- 教員に質問する場合には，メールで約束をとり部屋を訪問すること．基本的にメールのみでの質疑応答には応じません．
- 学生で集まって取り組む場合には，問題ごとに『誰と一緒に考えたか』を明記し，特にお世話になったと感じたときには Acknowledgment をつけること．また，相談後は各自で自分の言葉でレポートをまとめること．当然ながら他人のレポートのコピーは厳禁であり，不正が認められた段階で当該学生の成績は不可とする．
- 問題を解く際に文献やネットなどを参考にした場合には，問題ごとに References をつけること．

次は Brusselator (ブリュセレーター) と呼ばれる, 化学反応に関する数理モデルである.



ここで, k_1, k_2, k_3, k_4 は既知の反応速度定数であるとする.

物質 A, B は十分多量にあるため, それらの濃度 $[A], [B]$ は定数とみなせると仮定する. このとき, 以下の手順に従って X, Y の濃度変化の様子を調べることにより, 適切な条件下ではこの数理モデルが振動現象を表現していることを示せ. なお, このモデルの名称はブリュッセル学派が提唱したことによる.

1. X, Y の濃度 $[X], [Y]$ は時刻 t に応じて変化している. 質量作用の法則により, 反応スキーム (*) から $[X]$ と $[Y]$ の時間変化についての微分方程式を作れ.
2. (1) で求めた微分方程式において

$$x := \sqrt{\frac{k_3}{k_4}} [X], \quad y := \sqrt{\frac{k_3}{k_4}} [Y], \quad s := k_4 t, \quad a := \frac{k_1}{k_4} \sqrt{\frac{k_3}{k_4}} [A], \quad b := \frac{k_2}{k_4} [B]$$

と変換すれば, 次の連立微分方程式

$$(**) \begin{cases} \frac{dx(s)}{ds} = a - (b+1)x(s) + x(s)^2 y(s) \\ \frac{dy(s)}{ds} = bx(s) - x(s)^2 y(s) \end{cases}$$

が得られることを示せ.

以下では正の定数 a, b は $b > a^2 + 1$ をみたすと仮定する.
また, 微分方程式の右辺を

$$F(x, y) := a - (b+1)x + x^2 y, \quad G(x, y) := bx - x^2 y$$

とおく.

3. 連立微分方程式 (**) の平衡点 (x_*, y_*) を求めよ.
4. $x > 0, y > 0$ の範囲の (**) のヌルクラインの概形を xy 平面上に描け. ただし, 関数の極値やグラフの交点の座標, およびそれらの位置関係に注意を払うこと. 関数の凹凸は調べなくてよい.

(次頁へ続く)

5. 新しい関数を

$$u(s) := x(s) - x_*, \quad v(s) := y(s) - y_*$$

とおく．連立微分方程式 (**) を平衡点 (x_*, y_*) の周りで線形化 (1 次近似) したときに

$$\begin{pmatrix} \dot{u}(s) \\ \dot{v}(s) \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} u(s) \\ v(s) \end{pmatrix}$$

となる行列を M とおけば

$$M = \begin{pmatrix} b-1 & a^2 \\ -b & -a^2 \end{pmatrix}$$

であることを示せ．ただし, $u(s)$ の s に関する微分を $\dot{u}(s)$ のように表した．

6. 正の定数 a, b が $b > a^2 + 1$ をみたすならば, M の固有値の実部はすべて正であることを示せ．

(注意: 今回は M の固有値は虚数にもなりうるが, 固有方程式の判別式 D が正であると仮定して固有値がすべて実数としてもよい．ただし, 数学専攻の学生は虚数の場合も通用する答案を作ること.)

7. ここまでの情報をもとに, $b > a^2 + 1$ ならば Brusselator (ブリュセレーター) は振動化学反応を記述していることを, 自分の言葉で可能な範囲で説明せよ．