

|              |   |
|--------------|---|
| Title        | 吸着分子に対する非線形移流動態モデルとパターン形成   |
| Author(s)    | 武井, 康浩  |
| Citation     | 大阪大学, 2005, 博士論文  |
| Version Type |   |
| URL          | <a href="https://hdl.handle.net/11094/45851">https://hdl.handle.net/11094/45851</a>   |
| rights       |   |
| Note         | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。 |

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

|            |  |
|------------|--|
| 氏名         | 武井康浩   |
| 博士の専攻分野の名称 | 博士(工学)   |
| 学位記番号      | 第 19469 号  |
| 学位授与年月日    | 平成 17 年 3 月 25 日   |
| 学位授与の要件    | 学位規則第 4 条第 1 項該当<br>工学研究科応用物理学専攻                                   |
| 学位論文名      | 吸着分子に対する非線形移流動態モデルとパターン形成  |
| 論文審査委員     | (主査)<br>教授 八木 厚志<br>(副査)<br>教授 笠井 秀明 教授 岩崎 裕 助教授 木村 吉秀<br>助教授 谷 正彦 |

### 論文内容の要旨

本論文は、吸着分子に対する非線形移流動態モデルにおける非線形移流の効果とパターン形成について、数学解析および計算数学の手法を用いて研究した結果をまとめたものであり、以下の 8 つの章で構成されている。

第 1 章では、本研究の背景として、生命、物理、化学など様々な分野に見出される自律的構造形成について説明した。さらに、これらの現象の解明に向けた新たな視点として散逸構造やシナジェティクスといった概念や理論について紹介した。

第 2 章では、白金を触媒とした一酸化炭素の酸化反応に見られる吸着 CO 分子のパターン形成現象を取り上げ、このパターン形成現象を記述する数理モデルである非線形移流動態モデルを導入した。

第 3 章では、数学解析、数値計算に必要となる基礎事項を説明した。無限次元力学系における極限集合の概念である指数アトラクタについて、定義、構成定理、主な性質を述べるとともに、準線形抽象放物型発展方程式から定まる力学系への応用方法を述べた。さらに、離散化スキームの構成に必要な事項を説明した。

第 4 章では、非線形移流動態モデルに対して無限次元力学系における解の漸近的な振舞いを調べた。まず、時間局所解の構成および時間大域解の構成を行った。さらに、適切に無限次元力学系を定め、縮小半群のコンパクト摂動条件を示すことにより指数アトラクタを構成した。

第 5 章では、非線形移流動態モデルの一樣定常解の構造を解析した。はじめに、一樣定常解の存在条件を調べた。次に、線形化安定性解析により一樣定常解の安定性を調べた。最後に、モデルの係数に対する一樣定常解の数理構造の変化を調べた。

第 6 章では、非線形移流動態モデルの解を数値的に追跡するための離散化スキームについて、その実装方法を述べた。ここでは、FEM-RK および ADI スキームの構成方法を述べ、それらから得られる非線形連立関数方程式の数値解法について工夫点を含め説明した。

第 7 章では、数値計算により得られたパターン解についてまとめた。はじめに、ネットワークパターン解、樹状パターン解のように非常に長い時間を経て変化する解の特性を示した。次に、ストライプをはじめ多彩な定常パターン解について、係数に対する形状の変化を調べた。また、2 種類のターゲットパターン解を取り上げ、その時間変化の違いを示した。そして最後に、パターン解を無限次元力学系における解の軌跡と対応させ考察をした。

第8章では、本研究により得られた知見についてまとめた。加えて、本研究で解決されなかった問題を示し結びとした。

## 論文審査の結果の要旨

白金表面において、吸着 CO 分子と表面構造との相互作用から引き起こされる CO 分子の多彩な吸着パターンが観察されている。このような吸着パターンの発現メカニズムの解明と制御法の開発を目指して異なったスケールの数理モデルが提案されている。本論文は、Hildebrand-Ertl 等により提案された、吸着 CO 分子の非線形移流と白金表面の相転移効果とが組み込まれたナノスケールモデルに着目し数学解析並びに計算数学の方法により研究したもので、その成果は以下の3点に集約することができる。

1. 適切な状態空間を設定し、そこで時間大域的解析解を構成するとともに無限次元力学系を構成している。さらに解作用素が Compact Smoothing 条件を満たすことを示し、本力学系には指数アトラクタが存在することを示している。この結果から、吸着パターンの形成には有限個の自由度のみが関わり他の無限個の変数はそれらに従属していること、すなわち本モデルにおいて隷属化の一般原理が成り立っていることを明らかにしている。
2. モデル内に含まれる様々なパラメータの変化とその解析解への影響を調べた結果、熱力学的パラメータが十分小さいときは空間一様定常解が安定となりパターン解は出現しないこと、一方で同パラメータが大きくなると空間一様定常解が不安定化し結果としてパターン解が出現すること、さらに同パラメータが十分大きくなると再び安定な空間一様定常解が現れそれと同時にパターン解が消滅することを見出している。このことから、モデルに含まれる多数のパラメータのうち熱力学的パラメータがパターン形成に最も大きく寄与する、いわゆる制御パラメータであると結論付けている。
3. 熱力学的パラメータを始めとしてその他のパラメータを適切に設定すると、本モデルから多様なパターン解が得られることを示している。パターン解は、時間発展の初期段階に見られる推移パターン、時間発展とともに長期間に渡って成長していく発展パターン、空間非一様定常解として得られる定常パターンの3種類に大きく分かれ、さらに推移パターンは同心円とミシン目同心円に、発展パターンは樹状とネットワークに、定常パターンは帯状、六角形、蜂の巣、斑点、市松などにそれぞれ分類できることを示している。

以上のように、本論文は白金表面における CO 分子吸着パターンに関するナノスケールモデルを数学解析と計算数学の方法で研究し、パターン形成メカニズムにかかわる基本的な知見を得たもので、応用物理学、特に数理工学に寄与することが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。