

氏名 (本籍)	NOVRIANTI (インドネシア共和国)
学位の種類	博士 (工学)
学位授与番号	甲第593号
学位授与日付	令和3年3月25日
専攻	生産開発システム工学専攻
学位論文題目	Mathematical analysis for the reaction-diffusion equations of Belousov-Zhabotinsky reaction (ペロウソフ・ジャボチンスキー反応の反応拡散方程式に対する数学解析)
学位論文審査委員	(主査) 教授 宇佐美 広介 (副査) 教授 亀山 敦 准教授 近藤 信太郎 教授 澤田 宙広 (外部審査委員)

論文内容の要旨

The research subject of this thesis is a reaction-diffusion equation that describes a chemical reaction called Belousov-Zhabotinsky (BZ) reaction. The BZ system is a kind of reaction-diffusion system which was discovered by B.P. Belousov in 1951, and it was studied in detail by A.M. Zhabotinsky later. The BZ system has remained a prototype for nonlinear chemical systems. Due to the changing of color in the reaction by temporal and spatial processing, this reaction has the interest to be observed. It demonstrates the oscillations, consecutive pulse from the source center, and also self-organizing patterns. Oregonator model was proposed by R.J. Field et al (1972) to capture the features of BZ reaction without dealing with the intermediate details in three processes by five reactions. A three variables simplified model of the Oregonator model was proposed by R. J. Field and R. M. Noyes in 1972. After that, a two variables simplified model of the Oregonator model was proposed by J. J. Tyson and P.C. Fife in 1980. In this thesis, we study mathematically the reaction-diffusion equations of Keener-Tyson type for BZ reaction. Regarding the reaction-diffusion equations of BZ reaction we obtain the following two results.

- (i) The time-global existence of unique smooth positive solutions to the reaction-diffusion equations of the Keener-Tyson model for the Belousov-Zhabotinsky reaction in the whole space is established with bounded nonnegative initial data. By deriving estimates of semigroups and time evolution operators, and applying the maximum principle, the unique existence and the positivity of solutions are ensured by construction of time-local solutions from certain successive approximation. Invariant regions and large time behavior of solutions are also discussed. Here, the main issue is to ensure the positivity of trigger function. The Keener-Tyson model is a two-variable partial differential equation with a reaction term and a diffusion term where the reaction term is in the form of a fraction. Hence there is a difficulty at the stage of showing positiveness for the solution determined by the successive approximation sequence. In this thesis the author devised a rigorous proof of it.
- (ii) Besides, the existence of positive solutions to the system of ordinary differential equations related to the Belousov-Zhabotinsky reaction is established. The Keener-Tyson model is a two-variable partial differential equation with a reaction term and a diffusion term where the reaction term is in the form of a fraction. Hence when performing numerical calculations, if the denominator of the fraction takes a value close to 0 or a negative value, an error may occur in the numerical calculation. The key idea is to use a new successive approximation of solutions, then ensuring its positivity. To obtain the positivity and invariant region for numerical solutions, the system is discretized as difference equations of explicit form, employing operator splitting methods with linear stability conditions. Algorithm to solve the alternate solution is given.

論文審査結果の要旨

本論文はBZ反応（ベロウソフ・ジャボチンスキー反応）と呼ばれる化学反応を記述する反応拡散方程式に対する数学解析の研究成果をまとめたものである。BZ反応は酸化反応と還元反応を交互に繰り返す現象であり、多くの化学反応の過程が複雑にからみあった現象である。Oregonatorモデルは、中間的化学反応を無視した5つの化学反応プロセスを記述するモデルであり、さらにそれを単純化した2変数の反応拡散方程式が提案されている。本論文では、Keener-Tysonタイプと呼ばれる2変数の反応拡散モデルに対して数学解析の研究を行った。反応拡散方程式とは、化学反応を記述する反応項と、拡散項を含む偏微分方程式のことである。Keener-Tysonタイプの反応拡散方程式は、酸化と還元を表す未知関数 u, v をもつ。第1章では概要と論文構成を説明して、第2章ではKeener-Tysonタイプの反応拡散方程式の導出過程の説明などを行っている。第3章と第4章では得られた研究成果とその証明の紹介をしている。第3章では、Keener-Tysonタイプの反応拡散方程式に対して時間局所解が一意に存在することの証明を与えた。証明には逐次近似法を用いたが、反応項が分数の形をしており、分母がゼロになると証明が破綻してしまうという問題点があった。そこで、各々の段階における近似解が負の値をとらないことを証明することによって、その問題点を克服した。次に、不変領域と呼ばれるサイズが有限の領域が存在して、ある時刻に解が不変領域の中にあるならば、その後も解が不変領域の中にとどまり続けることを証明した。第4章では、数値解法アルゴリズムの提案とその解が正値性をもつことの証明を与えた。Keener-Tysonタイプの反応拡散方程式の数値計算アルゴリズムとして、拡散項を無視した差分方程式の解と、反応項を無視した差分方程式の解を交互に用いる Operator splitting methods と呼ばれる数値解法を考えた。Operator splitting methods は、流体を記述する渦度方程式の数値解法にも用いられている方法である。拡散項を無視した差分方程式の解が負の値をとらないことを証明することがキーとなるが、それには第3章で用いた証明方法と類似のアイデアを用いた。以上の研究成果は、BZ反応を記述する反応拡散方程式に対する新規性のある研究成果であり、BZ反応の現象の解明および応用的研究の発展につながることを期待される。したがって、学位審査委員会は、本論文が博士（工学）の学位を授与するに値するものと判定した。

最終試験結果の要旨

第3章と第4章に記載した研究成果は、それぞれ査読付き学術論文に投稿された。第3章の内容は掲載決定済みの発表論文[2]にまとめられており、第4章の内容は掲載済みの発表論文[1]にまとめられている。2021年2月3日に開催した公聴会における質疑応答などに基づき審査を行い、審査委員全員一致で最終試験に合格と判定した。

発表論文

[1] Positivity-Preserving Numerical Methods for Belousov-Zhabotinsky Reaction, Y. Adachi, [Novrianti](#), and O. Sawada, *Applied Mathematics*, 11, 943-950 (2020).

[2] A well-posedness for the reaction-diffusion equations of Belousov-Zhabotinsky reaction, S. Kondo, [Novrianti](#), O. Sawada, and N. Tsuge, *Osaka J. Math* (2020). 印刷中