

Bifurcation structure of steady-states for an adsorbate-induced phase transition model *

福岡工業大学工学部 久藤 衡介 (Kousuke Kuto) †
Faculty of Engineering, Fukuoka Institute of Technology

1 表面化学モデルに現れる反応拡散移流系

白金表面に吸着した一酸化炭素分子と酸素原子が化学結合し二酸化炭素となって空気中に離脱する現象は、一酸化炭素の酸化無害化として自動車の排気装置にも利用されている。このような「分子が固体触媒に吸着・離脱する化学プロセス」の解明は、Ertl の基礎的研究によって大いに進展した (Ertl は表面化学のにおける様々な功績が認められ、2007 年にノーベル化学賞を受賞している)。とかく、一酸化炭素分子の吸着によって白金板上に様々な模様を呈する現象が可視化され、化学反応のパターン形成として興味を集めている。Ertl と同じく Max-Planck 研究所に籍を置く Hildebrand は、このパターン形成を模する数理モデルとして次の反応拡散移流系を提唱した ([1]) :

$$(P) \begin{cases} u_t = d\Delta u + u(1-u)(u+v-1), & (x, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ v_t = D\Delta v + D\alpha \nabla \cdot \{v(1-v)\nabla \chi(u)\} + g(u, v), & (x, t) \in \Omega \times (0, \infty), \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = 0, & (x, t) \in \partial\Omega \times (0, \infty), \\ u(\cdot, 0) = u_0, \quad v(\cdot, 0) = v_0, & x \in \Omega. \end{cases}$$

ここで、 $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ は滑らかな境界 $\partial\Omega$ をもつ有界領域で白金板に対応する。また、拡散や移流の係数 d, D, α は正定数とする。未知関数である $u = u(x, t)$ および $v = v(x, t)$ はそれぞれ、場所 x , 時刻 t における白金の状態を示すオーダーパラメーターおよび一酸化炭素分子の白金板に対する吸着率を表す。第 2 式の $\chi(u)$ および $g(u, v)$ は

$$\chi(u) = u^2(2u - 3), \quad g(u, v) = c(1 - v) - ae^{\alpha\chi(u)}v - bv, \quad (1.1)$$

* 辻川亨教授 (宮崎大学工学部) との共同研究に基づく。

† e-mail address: kuto@fit.ac.jp

で定義される関数で, a, b, c は正定数である.

ここで (P) の概観を数理モデルの見地から説明してみよう. 第 1 式にある双安定型の非線形項 $u(1-u)(u+v-1)$ は, 白金のオーダーパラメーター u が, 一酸化炭素分子の吸着率 v に応じて, 0 と 1 の間に値をとる状況を記述している. 実際, 辻川-八木 [11] によって, 滑らかな初期関数 (u_0, v_0) が 0 と 1 の間に挟まれていれば $(0 \leq u_0, v_0 \leq 1)$, (P) の解 (u, v) も未来永劫 0 と 1 の間に挟まれ,

$$0 \leq u(x, t), v(x, t) \leq 1, \quad (x, t) \in \Omega \times (0, \infty) \quad (1.2)$$

を満たすことが示されている. 第 2 式の移流項 $\nabla \cdot \{v(1-v)\nabla\chi(u)\}$ は, $\chi(u)$ が $u = 1$ で最小値をとることから, 一酸化炭素分子が白金板上で $u \sim 1$ の地域に向かって移流する傾向を模している. また c は気相の圧力であって, $c(1-v)$ は一酸化炭素分子の白金板に対する吸着を意味する. さらに, $-ae^{\alpha\chi(u)}v$ は一酸化炭素分子の熱力学的な離脱を, $-bv$ は化学反応による離脱を表している. このような「移流」や「反応」に加え「拡散」によって駆動される白金構造や一酸化炭素分子のパターンダイナミクスを解明することが, (P) を研究する際の究極的な目標である.

これまで Hildebrand, Mikhailov, Ertl らの研究グループは, 特異摂動法によって (P) の定常的なストライプパターンやスポットパターンを構成している ([2],[3]). また, [11] や 武井-Efendiev-辻川-八木 [9] は (1.2) に加えて, (P) の解を吸引する指数アトラクタの存在を示している. さらに, 武井-辻川-八木 [10] の数値シミュレーションでは様々なネットワークパターンが観測されており, 実際, 久藤-辻川 [4] によって定常的な六角形パターンが分岐理論で得られている.

2 定常問題で $D \rightarrow \infty$ としたシャドウ系

ここでは白金板上における一酸化炭素分子の運動に焦点を当て, v に対する拡散と移流の係数 D を大きくしたときに, (P) の定常解がどのように振舞うかを考える. そのために, (P) の定常問題で $D \rightarrow \infty$ とした極限系を導出する. まず, (P) に関する定常問題の第 2 式の両辺を D で割った後に, 形式的に $D \rightarrow \infty$ とすると, 楕円型方程式系

$$\begin{cases} d\Delta u + u(1-u)(u+v-1) = 0, & x \in \Omega, \\ \nabla \cdot \{\nabla v + \alpha v(1-v)\nabla\chi(u)\} = 0, & x \in \Omega, \\ \frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = 0, & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (2.1)$$

が得られる。(P) の定常問題の第 2 式を積分した上で形式的に $D \rightarrow \infty$ とすると、ガウスの発散定理から

$$\int_{\Omega} g(u, v) dx = 0 \quad (2.2)$$

が得られる。そこで (2.1)-(2.2) を、(P) の定常問題で $D \rightarrow \infty$ としたシャドウ系と呼ぶことにする (反応拡散系におけるシャドウ系の命名は西浦 [6] による)。

本来、(2.1)-(2.2) は空間 2 次元のモデルであるが、ここでは足がかりとして、空間 1 次元に単純化した問題を考える。空間 1 次元の $\Omega = (0, 1)$ のケースでは、(2.1) の第 2 式は変数分離で解けて、

$$v(u, \lambda) = \frac{1}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} \quad (2.3)$$

と表される。ここで、 $\lambda = v(0)e^{\alpha x(u(0))}/(1 - v(0))$ はパラメーターと考える。したがって、(2.3) を (2.1) に代入して、空間 1 次元のシャドウ系は、非線形常微分方程式の境界値問題

$$(B) \begin{cases} du'' + u(1-u) \left(u + \frac{1}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} - 1 \right) = 0, & 0 < x < 1, \\ u'(0) = u'(1) = 0 \end{cases}$$

を積分条件

$$(I) \int_0^1 \frac{ae^{\alpha x(u)} + b + c}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} dx = c$$

の下で考えればよいことになる。

ところで、(P) の定常問題において、形式的に $D \rightarrow \infty$ として、シャドウ系 (2.1)-(2.2) を導出したが、実際は (P) の定常解 (u, v) は D に依存するため、(2.1)-(2.2) の正值解の摂動が D が大きいケースの (P) の正值解を与えるかは証明すべき問題である。この問題に関して、我々は現状で次の結果を得ている：

定理 2.1. 空間 1 次元のケースで、十分大きい $D > 0$ に対して (P) が正值定常解 (u_D, v_D) をもつと仮定する。このとき、 $\lim_{j \rightarrow \infty} D_j \rightarrow \infty$ を満たす部分列 $\{u_{D_j}, v_{D_j}\}$ およびシャドウ系 (B)-(I) の正值解 u が存在して、 $C^1([0, 1])$ の位相で

$$\lim_{D_j \rightarrow \infty} (u_{D_j}, v_{D_j}) = (u, v) \quad (2.4)$$

が成り立つ。ただし v は、ある $\lambda > 0$ に対して (2.3) を満たす関数である。

定理 2.1 の (2.4) により、シャドウ系 (B)-(I) の正值解 (u, v) が、 D が大きいケースの (P) の正值定常解に近いことが分かる。したがって、シャドウ系 (B)-(I) の解構造の解明は、拡

散と移流の効果 D を定常解の立場から引き出す上でも重要である。ただ「 D が大きいときに、実際に (P) が正值定常解をもつか？」という問題は残されている。我々はこの問題を肯定的な予想の下で検討中である。定理 2.1 の証明は [5] を参照されたい。

それでは、シャドウ系 (B)-(I) の解析に移ろう。(B)-(I) を解法は次の手順に従う：

- (1) d と λ をパラメーターとして、境界値問題 (B) の解を得る。
- (2) (B) の解集合から積分条件 (I) を満たすものを、シャドウ系の解として抽出する。

3 双安定型の非線形項をもつ拡散方程式の定常解

本章で、境界値問題 (B) の解構造を得よう。まず、各 $\lambda > 0$ に対して、非線形項

$$f(u, \lambda) := u(1-u) \left(u + \frac{1}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} - 1 \right) \quad (3.1)$$

は「双安定型」であり、(B) は (単独方程式の意味で) 安定なふたつの定数解 $u = 0$ および $u = 1$ に加え、それらの間にもうひとつの定数解 $u = u_c(\lambda)$ をもつ。さらに、 $u_c(\lambda)$ は $\lambda > 0$ に関して単調増加であって、

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} u_c(\lambda) = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} u_c(\lambda) = 1 \quad (3.2)$$

であることも確かめられる。ここで、興味の対象は非定数な正值解であるが、空間 1 次元の場合、単調増加な解のみ捕まえば、そのスケールリングや折り返しによって全ての非定数解が得られる。そこで、(B) の単調増加な正值解の集合

$$\Gamma = \{(u, d) \in C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}_+ \mid u \text{ は (B) の単調増加な正值解}\} \quad (3.3)$$

の分岐構造を調べる。

一般に、(3.1) のような双安定型の非線形項を伴う拡散方程式については、 $d > 0$ が十分に小さいとき、単調増加な定常解が 0 に近いのか 1 に近いかは、非線形項の積分の符号によって決まることが知られている。その意味で

$$I(\lambda) := \int_0^1 f(u, \lambda) du$$

の符号を調べることは重要である。若干の計算をすると $I(\lambda)$ は $\lambda = e^{\alpha/2}$ で符号変化し、

$$\begin{cases} I(\lambda) > 0 & (0 < \lambda < e^{\alpha/2}), \\ I(e^{\alpha/2}) = 0, \\ I(\lambda) < 0 & (e^{\alpha/2} < \lambda) \end{cases}$$

であることが分かる (図 1 参照). また (3.2) を満たす定数解 $u_c(\lambda)$ は $u_c(e^{\alpha/2}) = 1/2$ を満たす. ここで,

$$d^*(\lambda) = \frac{f_u(u_c(\lambda), \lambda)}{\pi^2}$$

とおく. 容易に $d^*(\lambda) > 0$ が確かめられる.

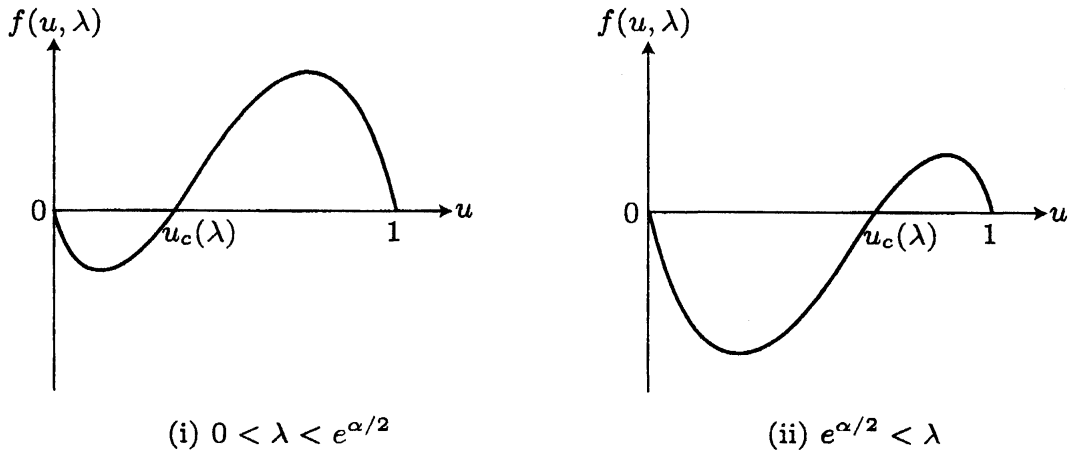


図 1

上記の準備の下, time-map 法 ([7], [8] 参照) を使うと, (B) の単調増加な解集合 Γ のなす有界な分岐枝が得られる. とくに $0 < \lambda < e^{\alpha/2}$ のときは, 十分小さい $d > 0$ に対して, 解 u は区間右端付近にレイヤー (遷移層) をもつ小さい関数をなす:

定理 3.1. $0 < \lambda < e^{\alpha/2}$ とする. このとき (3.3) で定義された (B) の単調増加な解集合 Γ は $d = d^*(\lambda)$ で定数解 $u = u_c(\lambda)$ から分岐する滑らかな有界曲線をなす. より詳しく, Γ は $s = u(0)$ によって

$$\Gamma = \{(u, d) = (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda)) \in C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}_+ \mid 0 < s < u_c(\lambda)\} \quad (3.4)$$

とパラメーター表示されて, 分岐点付近では $C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}$ の位相で

$$\lim_{s \rightarrow u_c(\lambda)} (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda)) = (u_c(\lambda), d^*(\lambda)) \quad (3.5)$$

を満たす. 一方 $s \rightarrow 0$ のとき,

$$\int_0^\eta f(u, \lambda) du = 0$$

なる $\eta > 0$ に対し, $\lim_{s \rightarrow 0} d(s, \lambda) = 0$ および

$$\lim_{s \rightarrow 0} u(x, s, \lambda) = \begin{cases} 0 & (0 \leq x < 1), \\ \eta & (x = 1) \end{cases} \quad (3.6)$$

を満たす. このとき, 任意の $0 < \varepsilon < 1$ に対して, $[0, 1-\varepsilon]$ 上で一様に $\lim_{s \rightarrow 0} u(\cdot, s, \lambda) = 0$ である.

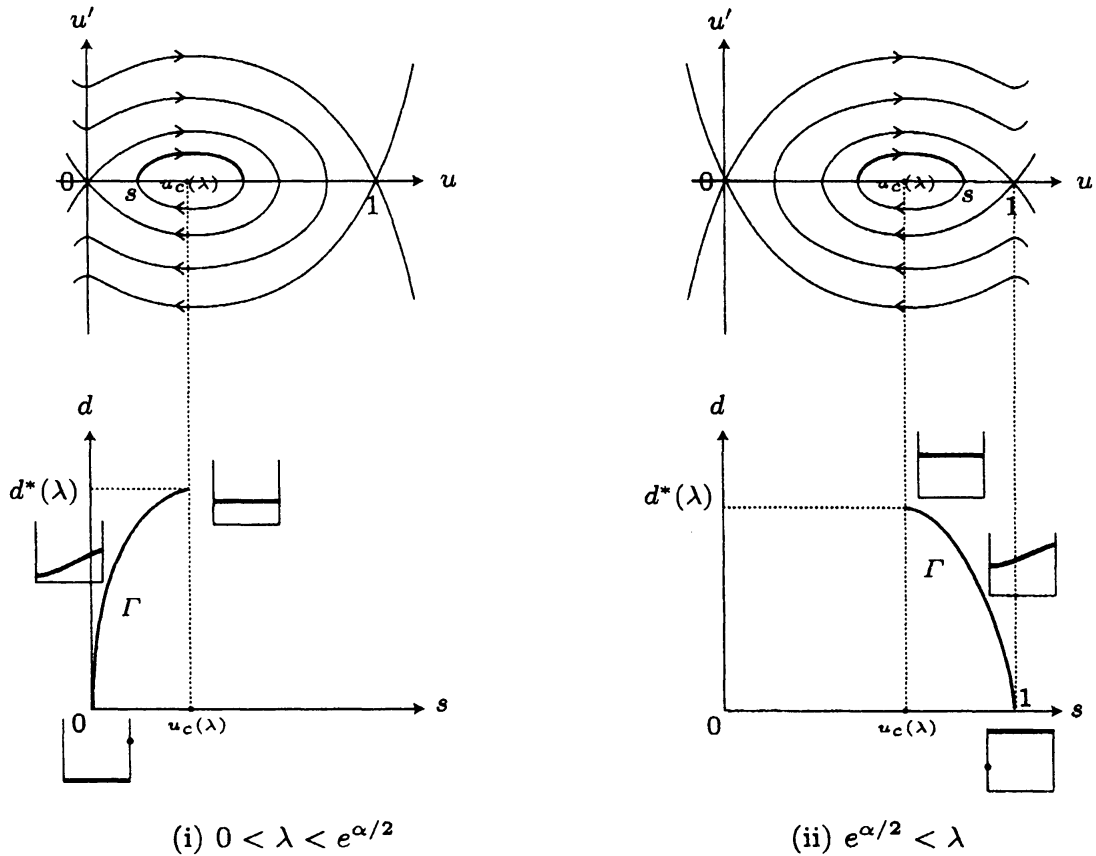


図 2 : 初期値問題の解軌道と (B) の単調増加な解がなす分岐ダイアグラム

一方で $e^{\alpha/2} < \lambda$ のとき, 十分小さい $d > 0$ に対して, 解 u は区間左端付近にレイヤーをもつ 1 に近い関数をなす:

定理 3.2. $e^{\alpha/2} < \lambda$ のとき, Γ は $d = d^*(\lambda)$ で定数解 $u = u_c(\lambda)$ から分岐する滑らかな有界曲線をなす. このとき, Γ は $s = u(1)$ によって

$$\Gamma = \{(u, d) = (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda)) \in C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}_+ \mid u_c(\lambda) < s < 1\} \quad (3.7)$$

とパラメーター表示されて, 分岐点付近では $C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}$ の位相で

$$\lim_{s \rightarrow u_c(\lambda)} (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda)) = (u_c(\lambda), d^*(\lambda)) \quad (3.8)$$

を満たす. 一方 $s \rightarrow 1$ のとき,

$$\int_{\zeta}^1 f(u, E) du = 0$$

なる $\zeta > 0$ に対し, $\lim_{s \rightarrow 1} d(s, \lambda) = 0$ および

$$\lim_{s \rightarrow 1} u(x, s, \lambda) = \begin{cases} \zeta & (x = 0), \\ 1 & (0 < x \leq 1) \end{cases} \quad (3.9)$$

を満たす. このとき, 任意の $0 < \varepsilon < 1$ に対して, $[\varepsilon, 1]$ 上で一様に $\lim_{s \rightarrow 1} u(\cdot, s, \lambda) = 1$ である.

4 1次元シャドウ系の定常解構造

定理 3.1 および 3.2 においては, 境界値問題 (B) の単調増加な解がなす分岐曲線 Γ を得た. そこで Γ の中から, 積分条件 (I) を満たす関数を選び出すことによって, シャドウ系 (B)-(I) の解を得よう.

定理 3.1 および 3.2 より, 写像

$$(s, \lambda) \mapsto (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda))$$

の定義域は

$$\mathcal{P} := \{(s, \lambda) : 0 < s < u_c(\lambda), 0 < \lambda < e^{\alpha/2}\} \quad (s = u(0))$$

および

$$\mathcal{Q} := \{(s, \lambda) : u_c(\lambda) < s < 1, e^{\alpha/2} < \lambda\} \quad (s = u(1))$$

の和集合であって,

$$(s, \lambda) \mapsto (u(\cdot, s, \lambda), d(s, \lambda)) : \mathcal{P} \cup \mathcal{Q} \rightarrow C^2([0, 1]) \times \mathbb{R}$$

は連続であることが分かる. ここでの問題は積分条件 (I), すなわち

$$\int_0^1 \frac{ae^{\alpha x(u)} + b + c}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} dx = c \quad (4.1)$$

を満足する $u(\cdot, s, \lambda) \in \Gamma$ を見つけることである. そこで (4.1) の左辺に対応して,

$$\Phi(s, \lambda) := \int_0^1 \frac{ae^{\alpha x(u)} + b + c}{1 + \lambda e^{\alpha x(u)}} dx \quad (4.2)$$

を $u(\cdot, s, \lambda) \in \Gamma$ に対して定義しよう. すると問題は, 連続写像

$$(s, \lambda) \mapsto \Phi(s, \lambda) : \mathcal{P} \cup \mathcal{Q} \rightarrow \mathbb{R}$$

に対して,

$$\Phi(s, \lambda) = c \tag{4.3}$$

を満たす $(s, \lambda) \in \mathcal{P} \cup \mathcal{Q}$ を求めることにほかならない.

方程式 (4.3) を解くために, $\Phi(s, \lambda)$ において $s \rightarrow u_c(\lambda)$ とした極限関数

$$\Phi^*(\lambda) := \lim_{s \rightarrow u_c(\lambda)} \Phi(s, \lambda)$$

を導入しよう. このとき (3.5) および (3.8) より, (4.2) において $s \rightarrow u_c(\lambda)$ とすると,

$$\Phi^*(\lambda) = \frac{ae^{\alpha x(u_c(\lambda))} + b + c}{1 + \lambda e^{\alpha x(u_c(\lambda))}} \tag{4.4}$$

を得る. ここで, $\Phi^*(\lambda)$ は $\lambda \in (0, \infty)$ に関して連続である.

また $0 < \lambda < e^{\alpha/2}$ のとき, 定理 3.1 の $\lim_{s \rightarrow 0} d(s, \lambda) = 0$ に注意して, $\Phi(s, \lambda)$ において $s \rightarrow 0$ とした極限関数を

$$\Phi^0(\lambda) := \lim_{s \rightarrow 0} \Phi(s, \lambda) \quad (0 < \lambda < e^{\alpha/2})$$

と定義する. すると (3.6) より, $\Phi^0(\lambda)$ は

$$\Phi^0(\lambda) = \frac{a + b + c}{1 + \lambda} \quad (0 < \lambda < e^{\alpha/2}) \tag{4.5}$$

と表される.

一方 $e^{\alpha/2} < \lambda$ のとき, 定理 3.2 の $\lim_{s \rightarrow 1} d(s, \lambda) = 0$ に注意して, $\Phi(s, \lambda)$ において $s \rightarrow 1$ とした極限関数を

$$\Phi^1(\lambda) := \lim_{s \rightarrow 1} \Phi(s, \lambda) \quad (e^{\alpha/2} < \lambda)$$

と書くことにする. すると (3.9) より, $\Phi^1(\lambda)$ は

$$\Phi^1(\lambda) = \frac{ae^{-\alpha} + b + c}{1 + \lambda e^{-\alpha}} \quad (e^{\alpha/2} < \lambda) \tag{4.6}$$

と表される.

4.1 $0 < \lambda < e^{\alpha/2}$ の場合

今節では, (4.3) を満たす $(s, \lambda) \in \mathcal{P}$ を求める. そのために, 極限関数 $\Phi^0(\lambda)$ および $\Phi^*(\lambda)$ の区間 $(0, e^{\alpha/2})$ 上の振る舞いを調べる:

補題 4.1. (4.5) および (4.4) でそれぞれ定義された $\Phi^0(\lambda)$ および $\Phi^*(\lambda)$ は区間 $(0, e^{\alpha/2})$ 上で次を満たす:

- (i) $c < ae^{-\alpha/2} - b$ のとき, $\Phi^0(\lambda)$ と $\Phi^*(\lambda)$ はともに $(0, e^{\alpha/2})$ 上で単調減少であって,
- $$\Phi^*(\lambda) < \Phi^0(\lambda) \quad (0 < \lambda < e^{\alpha/2}) \quad (4.7)$$

を満たす.

- (ii) $ae^{-\alpha/2} - b < c$ のとき, $\Phi^0(\lambda)$ は $(0, e^{\alpha/2})$ 上で単調減少である. このとき, $\Phi^*(\lambda)$ は $(0, a/(b+c))$ 上で単調減少であって

$$\begin{cases} \Phi^*(\lambda) < \Phi^0(\lambda) & \left(0 < \lambda < \frac{a}{b+c}\right), \\ \Phi^*(\lambda) > \Phi^0(\lambda) & \left(\frac{a}{b+c} < \lambda < e^{\alpha/2}\right) \end{cases} \quad (4.8)$$

を満たす (図 3 参照).

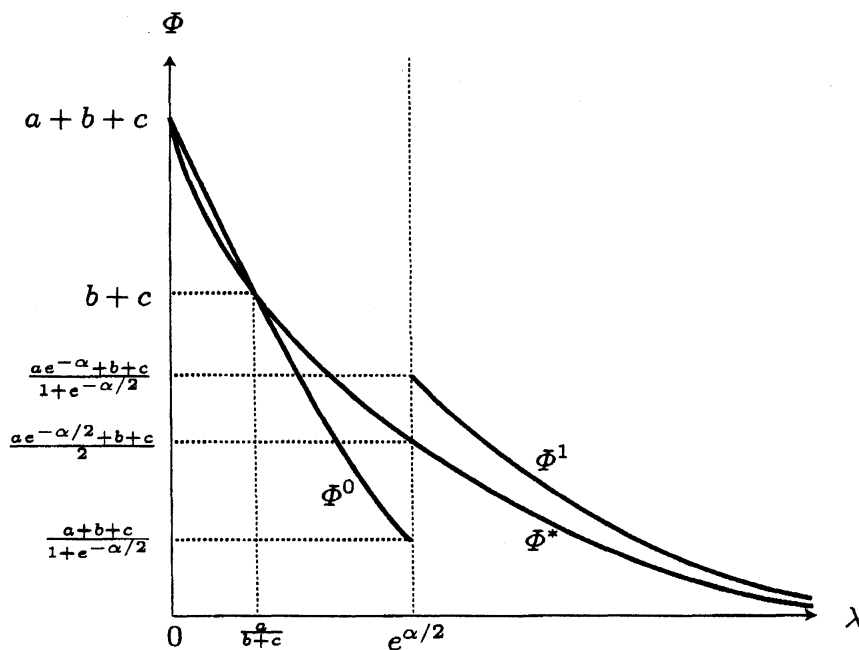


図 3: $ae^{-\alpha/2} - b < c$ の場合の Φ^* , Φ^0 , Φ^1 のグラフ

Proof. $\Phi^0(\lambda)$ が $(0, e^{\alpha/2})$ 上で単調減少であることは (4.5) より明らかである。そこで $\Phi^*(\lambda)$ の挙動を調べるために微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\lambda} \Phi^*(\lambda) &= \frac{a\alpha\chi_u(u_c(\lambda))u'_c(\lambda)e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}(1+\lambda e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))})}{(1+\lambda e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))})^2} \\ &\quad - \frac{(ae^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}+b+c)\{e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}+\lambda\alpha\chi_u(u_c(\lambda))u'_c(\lambda)e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}\}}{(1+\lambda e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))})^2} \\ &= \frac{e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}}{(1+\lambda e^{\alpha\chi(u_c(\lambda))})^2} \left[\alpha\chi_u(u_c(\lambda))u'_c(\lambda)\{a-(b+c)\lambda\} - (ae^{\alpha\chi(u_c(\lambda))}+b+c) \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

を得る。ここで (1.1) より $\chi_u(u_c(\lambda)) < 0$ であり、さらに $u'_c(\lambda) > 0$ であったことを思い出す。すると (4.9) より、 $\Phi^*(\lambda)$ は区間 $(0, a/(b+c))$ 上で単調減少であることが分かる。

ここで (4.7) および (4.8) を示すために、(4.4) で $u_c(\lambda)$ を ξ で置き換えた関数

$$\phi(\xi) := \frac{ae^{\alpha\chi(\xi)}+b+c}{1+\lambda e^{\alpha\chi(\xi)}} = \frac{a}{\lambda} + \frac{1}{1+\lambda e^{\alpha\chi(\xi)}} \left(b+c - \frac{a}{\lambda} \right)$$

を導入すると、 $\phi(0) = \Phi^0(\lambda)$ である。ここで $\chi'(\xi) < 0$ だから、任意に固定された

$$0 < \lambda < \min \left\{ e^{\alpha/2}, \frac{a}{b+c} \right\}$$

に対して、 $\phi(\xi)$ は区間 $(0, 1)$ 上で単調減少である。したがって $\phi(u_c(\lambda)) < \phi(0)$ 、すなわち、

$$\Phi^*(\lambda) < \Phi^0(\lambda) \quad \left(0 < \lambda < \min \left\{ e^{\alpha/2}, \frac{a}{b+c} \right\} \right) \quad (4.10)$$

が分かる。ここで

$$e^{\alpha/2} < \frac{a}{b+c} \quad \text{すなわち} \quad c < ae^{-\alpha/2} - b$$

のときは、(4.10) より直ちに (4.7) が従う

一方で、

$$\frac{a}{b+c} < e^{\alpha/2} \quad \text{すなわち} \quad c > ae^{-\alpha/2} - b$$

のときは、(4.10) より

$$\Phi^*(\lambda) < \Phi^0(\lambda) \quad \left(0 < \lambda < \frac{a}{b+c} \right) \quad (4.11)$$

である。このとき、(4.7) および $\chi'(\xi) < 0$ に注意すると、任意に固定された

$$\lambda \in \left(\frac{a}{b+c}, \infty \right)$$

に対して、 $\phi(\xi)$ は $(0, 1)$ 上で単調減少であることが分かる。すると $0 < \lambda < a/(b+c)$ のケースと同様の議論で、

$$\Phi^0(\lambda) < \Phi^*(\lambda) \quad \left(\frac{a}{b+c} < \lambda < e^{\alpha/2} \right) \quad (4.12)$$

が得られる。そして、(4.11) および (4.12) から (4.8) が従う。 \square

補題 4.1 を使い、 $\Phi(s, \lambda) = c$ を満たす $(s, \lambda) \in \mathcal{P}$ を見つけて、シャドウ系 (B)-(I) の解を得る：

定理 4.2. シャドウ系 (B)-(I) で a, b, c, α は

$$(a+b)e^{-\alpha/2} < c \quad (4.13)$$

を満たすとする。また $(u(\cdot; s, \lambda), d(s, \lambda)) \in \Gamma$ を (3.4) でパラメーター表示された (B) の単調増加な正值解とする。このとき $(a+b)/c < \bar{\lambda} \leq e^{\alpha/2}$ を満たす $\bar{\lambda}$ が存在して、任意の

$$\lambda \in \left(\frac{a+b}{c}, \bar{\lambda} \right)$$

に対し、 $\Phi(s(\lambda), \lambda) = c$ を満たす $(s(\lambda), \lambda) \in \mathcal{P}$ が得られる。この $(s(\lambda), \lambda) \in \mathcal{P}$ に対して、

$$u = u(\cdot, s(\lambda), \lambda), \quad d = d(s(\lambda), \lambda) \quad (4.14)$$

は (B)-(I) の正值解をなす。ここで $s(\lambda)$ は $((a+b)/c, \bar{\lambda})$ 上で下半連続であって、

$$s(\lambda) = u(0, s(\lambda), \lambda) \quad \left(\frac{a+b}{c} < \lambda < \bar{\lambda} \right), \quad \lim_{\lambda \rightarrow (a+b)/c} s(\lambda) = 0$$

および

$$\lim_{\lambda \rightarrow (a+b)/c} u(x, s(\lambda), \lambda) = 0 \quad (0 \leq x < 1), \quad \lim_{\lambda \rightarrow (a+b)/c} d(s(\lambda), \lambda) = 0 \quad (4.15)$$

に加えて、次を満たす：

- (i) $(a+b)e^{-\alpha/2} < c < ae^{-\alpha/2} + b$ ならば $\bar{\lambda} = e^{\alpha/2}$ である。
- (ii) $ae^{-\alpha/2} + b < c$ ならば、 $\bar{\lambda} < e^{\alpha/2}$, $\lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} s(\lambda) = u_c(\bar{\lambda})$ および

$$\lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} u(x, s(\lambda), \lambda) = u_c(\bar{\lambda}) \text{ in } C^2([0, 1]), \quad \lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} d(s(\lambda), \lambda) = d_1^*(\bar{\lambda}) \quad (4.16)$$

を満たす。

Proof. (4.13) のとき $(a+b)/c < e^{\alpha/2}$ だから (4.5) より,

$$\Phi^0\left(\frac{a+b}{c}\right) = c \quad (4.17)$$

である. さらに $\Phi^0(\lambda)$ の単調減少性より

$$\begin{cases} \Phi^0(\lambda) > c & \left(0 < \lambda < \frac{a+b}{c}\right), \\ \Phi^0\left(\frac{a+b}{c}\right) = c, \\ \Phi^0(\lambda) < c & \left(\frac{a+b}{c} < \lambda < e^{\alpha/2}\right) \end{cases} \quad (4.18)$$

が分かる. ここで (4.8) で得られた Φ^0 と Φ^* の交点 $\lambda = a/(b+c)$ に対して

$$\frac{a}{b+c} < \frac{a+b}{c} < e^{\alpha/2}$$

だから,

$$\Phi^0(\lambda) < \Phi^*(\lambda) \quad \left(\frac{a+b}{c} \leq \lambda < e^{\alpha/2}\right) \quad (4.19)$$

である. ここで (4.18), (4.19) を考慮して, $c < \Phi^*(e^{\alpha/2})$ および $c > \Phi^*(e^{\alpha/2})$ のケースに分けて $\Phi(s, \lambda) = c$ を満たす $(s, \lambda) \in \mathcal{P}$ を求める. ここで $u_c(e^{\alpha/2}) = 1/2$ および $\chi(1/2) = -1/2$ を (4.4) に代入して

$$\Phi^*(e^{\alpha/2}) = \frac{ae^{-\alpha/2} + b + c}{2}$$

である.

まず (4.13) に加え $c < \Phi^*(e^{\alpha/2})$ を仮定して, $(a+b)e^{-\alpha/2} < c < ae^{-\alpha/2} + b$ とする. このとき (4.18), (4.19) および $c < \Phi^*(e^{\alpha/2})$ より,

$$\Phi^0(\lambda) < c < \Phi^*(\lambda) \quad \left(\frac{a+b}{c} < \lambda < e^{\alpha/2}\right) \quad (4.20)$$

が分かる. ここで, 任意に固定された $\lambda \in (0, e^{\alpha/2})$ に対して, 写像

$$s \mapsto \Phi(s, \lambda) : (0, u_c(\lambda)) \rightarrow \mathbb{R}$$

は $\Phi^0(\lambda)$ から $\Phi^*(\lambda)$ まで連続的に変化することに注意する. したがって (4.20) より, 任意の $\lambda \in ((a+b)/c, e^{\alpha/2})$ に対して,

$$\Phi(s(\lambda), \lambda) = c \quad (4.21)$$

満たす $s = s(\lambda) \in (0, u_c(\lambda))$ が少なくともひとつは存在する. この $s(\lambda)$ を (3.4) の Γ に代入した (4.14) は, $\lambda \in ((a+b)/c, e^{\alpha/2})$ に対して (B)-(I) の解を与える. なお (4.21) を満たす最小の $s(\lambda)$ は $((a+b)/c, e^{\alpha/2})$ 上で下半連続となる. また (4.17) を使うと $\lim_{s \rightarrow (a+b)/c} s(\lambda) = 0$ が示される. さらに (3.6) を併せると, (4.15) も示され, 定理 4.2 の (i) の証明が完成する.

一方, $\Phi^*(e^{\alpha/2}) < c$ すなわち $c > ae^{-\alpha/2} + b$ のときは, (4.18) および (4.19) より, ある

$$\bar{\lambda} \in \left(\frac{a+b}{c}, e^{\alpha/2} \right)$$

に対して, $\Phi^*(\bar{\lambda}) = c$ および

$$\Phi^0(\lambda) < c < \Phi^*(\lambda) \quad \left(\frac{a+b}{c} < \lambda < \bar{\lambda} \right)$$

が成り立つことが分かる. このとき, 前段の議論と同様にして,

$$\Phi(s(\lambda), \lambda) = c \quad \left(\frac{a+b}{c} < \lambda < \bar{\lambda} \right)$$

および

$$\lim_{\lambda \rightarrow (a+b)/c} s(\lambda) = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} s(\lambda) = u_c(\bar{\lambda}) \quad (4.22)$$

を満たす下半連続関数 $s = s(\lambda)$ を得る. この $s(\lambda)$ は (3.7) を通じて, (B)-(I) の単調増加な正值解 (4.14) を与える. さらに (4.22) に注意すると (4.16) も得られて, 定理 4.2 の証明が完成する. \square

4.2 $e^{\alpha/2} < \lambda$ の場合

次に $e^{\alpha/2} < \lambda$ のケースで, (B)-(I) の単調増加な正值解を得る. 今度は $\Phi(s, \lambda) = c$ を満たす $(s, \lambda) \in \mathcal{Q}$ を求めるために, $\Phi^1(\lambda)$ および $\Phi^*(\lambda)$ の $(e^{\alpha/2}, \infty)$ 上の挙動を調べる.

補題 4.3. $\Phi^1(\lambda)$ および $\Phi^*(\lambda)$ の $(e^{\alpha/2}, \infty)$ 上の挙動について次が成り立つ:

- (i) $0 < c < ae^{-\alpha/2} - b$ のとき, $\Phi^1(\lambda)$ は $(e^{\alpha/2}, \infty)$ 上で単調減少である. このとき $\Phi^*(\lambda)$ は $(e^{\alpha/2}, a/(b+c))$ 上で単調減少であって, 次を満たす.

$$\begin{cases} \Phi^1(\lambda) < \Phi^*(\lambda) & \left(e^{\alpha/2} < \lambda < \frac{a}{b+c} \right), \\ \Phi^*(\lambda) < \Phi^1(\lambda) & \left(\frac{a}{b+c} < \lambda \right). \end{cases}$$

(ii) $ae^{-\alpha/2} - b < c$ のとき, $\Phi^1(\lambda)$ は $(e^{\alpha/2}, \infty)$ 上で単調減少であり,

$$\Phi^*(\lambda) < \Phi^1(\lambda) \quad (e^{\alpha/2} < \lambda)$$

を満たす (図 3 参照).

補題 4.3 の証明は [5] を参照されたい. さらに $0 < \lambda < e^{\alpha/2}$ のケースと類似の議論で, 補題 4.3 より (B)-(I) の解構造が得られる:

定理 4.4. シヤドウ系 (B)-(I) で a, b, c, α は $0 < c < ae^{-\alpha/2} + be^{\alpha/2}$ を満たすとする. さらに $(u(\cdot; s, \lambda), d(s, \lambda)) \in \Gamma$ を (3.7) でパラメーター表示された (B) の単調増加な正值解とする. このとき $e^{\alpha/2} \leq \underline{\lambda} < \bar{\lambda}$ が存在して, 任意の $\lambda \in (\underline{\lambda}, \bar{\lambda})$ に対して, (4.3) を満たす $(s(\lambda), \lambda) \in \mathcal{Q}$ が見つかり, (B)-(I) は単調増加な正值解

$$u = u(\cdot, s(\lambda), \lambda), \quad d = d(s(\lambda), \lambda)$$

をもつ. さらに $s(\lambda)$ は $(\underline{\lambda}, \bar{\lambda})$ 上で下半連続であって,

$$s(\lambda) = u(1, s(\lambda), \lambda) \quad (\underline{\lambda} < \lambda < \bar{\lambda}), \quad \lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} s(\lambda) = 1$$

および

$$\lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} u(x, s(\lambda), \lambda) = 1 \quad (0 < x \leq 1), \quad \lim_{\lambda \rightarrow \bar{\lambda}} d(s(\lambda), \lambda) = 0$$

に加えて, 次の性質を満たす:

(i) $c < ae^{-\alpha/2} + b$ ならば, $e^{\alpha/2} < \underline{\lambda}$, $\lim_{s \rightarrow \underline{\lambda}} s(\lambda) = u_c(\underline{\lambda})$ であって,

$$\lim_{\lambda \rightarrow \underline{\lambda}} u(x, s(\lambda), \lambda) = u_c(\underline{\lambda}) \quad \text{in } C^2([0, 1]).$$

(ii) $ae^{-\alpha/2} + b < c < ae^{-\alpha/2} + be^{\alpha/2}$ ならば, $\underline{\lambda} = e^{\alpha/2}$ である.

参考文献

- [1] M. Hildebrand, Selbstorganisierte nanostrukturen in katakyschen oberflächenreaktionen, Ph. D. dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I, Humboldt-Universität, Berlin, 1999.
- [2] M. Hildebrand, M. Ipsen, H. S. Mikhailov, G. Ertl, Localized nonequilibrium nanostructures in surface chemical reactions, *New J. Phys.*, **5** (2003), 61.1–61.28.

- [3] M. Hildebrand, M. Kuperman, H. Wio, A. S. Mikhailov, G. Ertl, Self-organized chemical nanoscale microreactors, *Phys. Rev. Lett.*, **83** (1999), 1475–1478.
- [4] K. Kuto, T. Tsujikawa, Pattern formation for adsorbate-induced phase transition model, *RIMS Kokyuroku Bessatsu*, **B3** (2007), 43–58.
- [5] K. Kuto, T. Tsujikawa, Stationary solutions of a shadow system for adsorbate-induced phase transition model, preprint.
- [6] Y. Nishiura, Global structure of bifurcating solutions of some reaction-diffusion systems, *SIAM J. Math. Anal.*, **13** (1982), 555–593.
- [7] R. Schaaf, Global solution branches of two-point boundary value problems. Lecture Notes in Mathematics, 1458. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [8] J. Smoller, A. Wasserman, Global bifurcation of steady-state solutions, *J. Differential Equations*, **39** (1981), 269–290.
- [9] Y. Takei, M. Efendiev, T. Tsujikawa, A. Yagi, Exponential attractor for an adsorbate-induced phase transition model in non smooth domains, *Osaka J. Math.*, **43** (2006), 215–237.
- [10] Y. Takei, T. Tsujikawa, A. Yagi, Numerical computations and pattern formation for adsorbate-induced phase transition model, *Scientiae Mathematicae Japonicae*, **61** (2005), 525–534.
- [11] T. Tsujikawa, A. Yagi, Exponential attractor for an adsorbate-induced phase transition model, *Kyushu J. Math.*, **56** (2002), 313–336.