2011.12.13

分岐理論

おもな分岐の種類

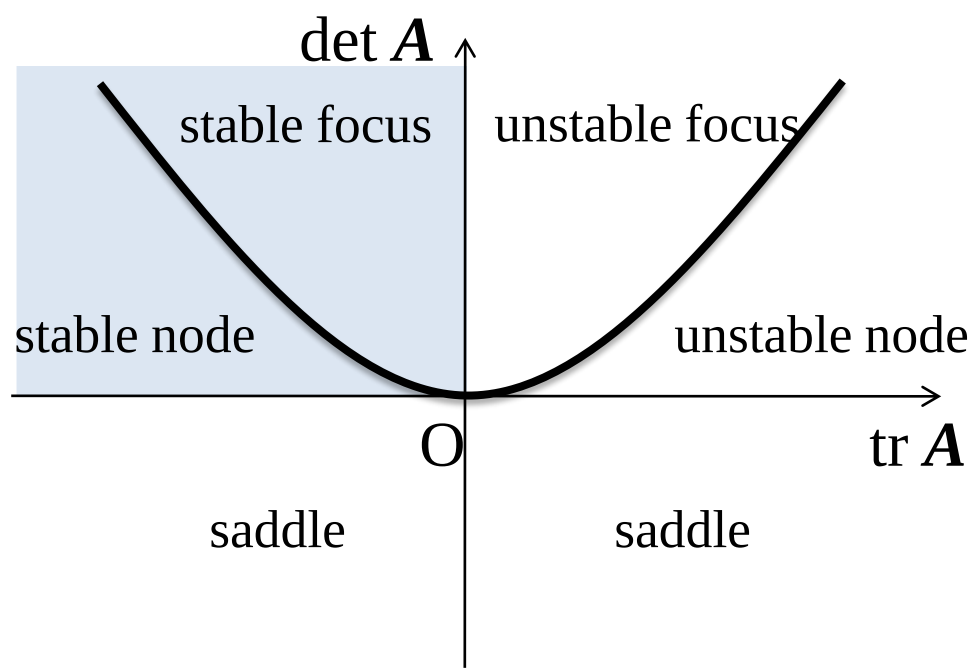
- サドル・ノード分岐
- ピッチフォーク分岐
- トランスクリティカル分岐（安定性交替分岐 ）
- ホップ分岐

分岐とは?

2変数の力学系で考える

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \boldsymbol{A}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{A}$: 関数行列



ただし、ホップ分岐以外では、x方向とy方向は独立しているので、
$\mathrm{d}y/\mathrm{d}t = a\,y$ として考えることにする。

- サドル・ノード分岐

$$u = \pm\sqrt{\alpha},\ v = 0\ \ (\alpha \geq 0)$$ まわりで

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \alpha - u^2$$

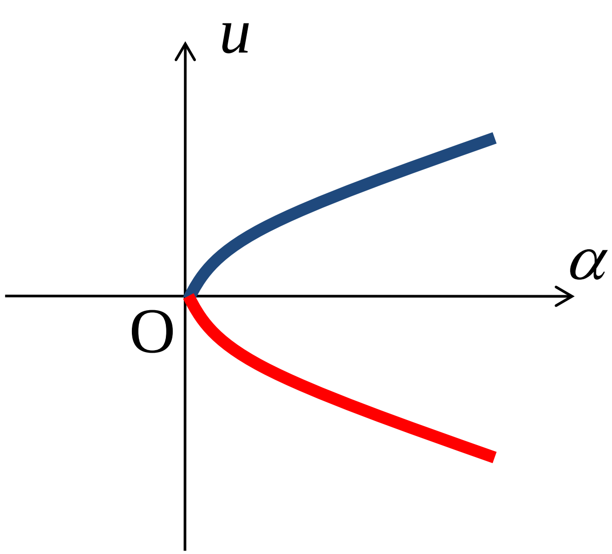
$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

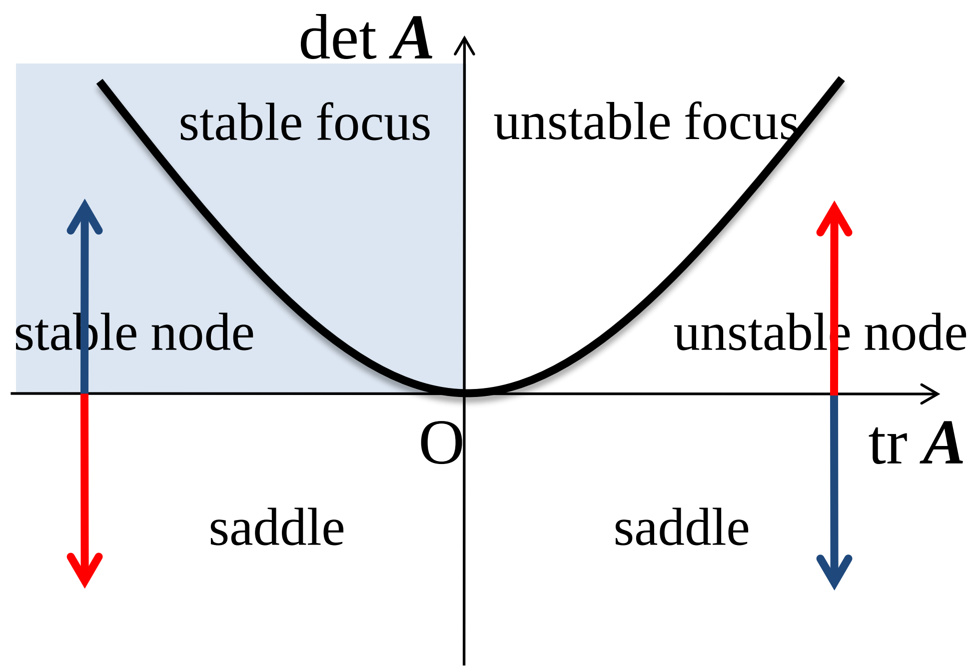
固定点：

$$u = \pm\sqrt{\alpha}$$

$$v = 0$$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \mp 2\sqrt{\alpha} & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$

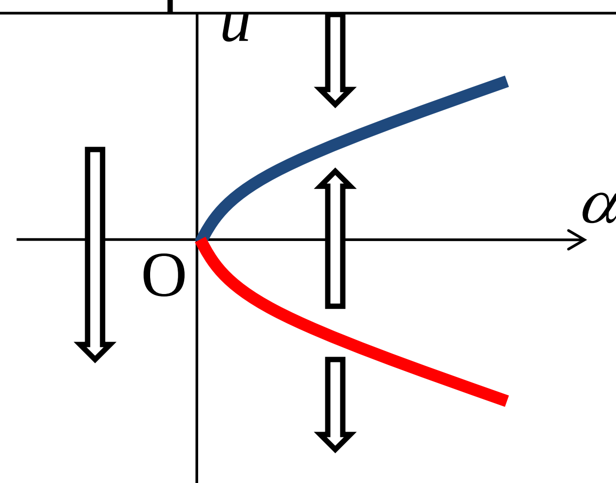




$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \alpha - u^2$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

$k = -5$



$k = 5$

- ピッチフォーク分岐

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \alpha u - u^3$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

固定点：

$$u = 0, \pm\sqrt{\alpha}$$

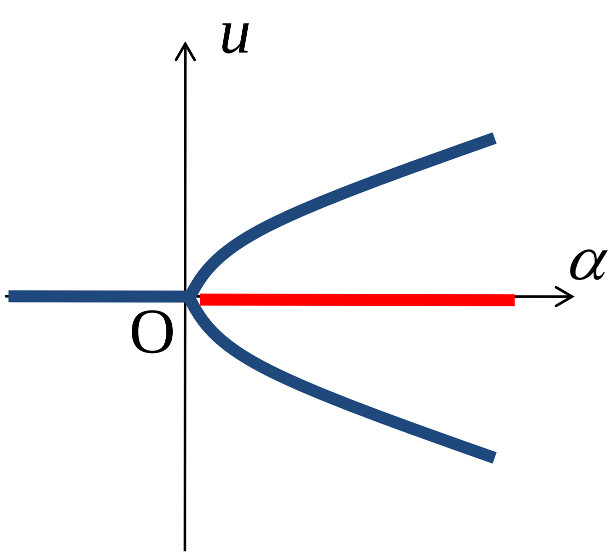
$$v = 0$$

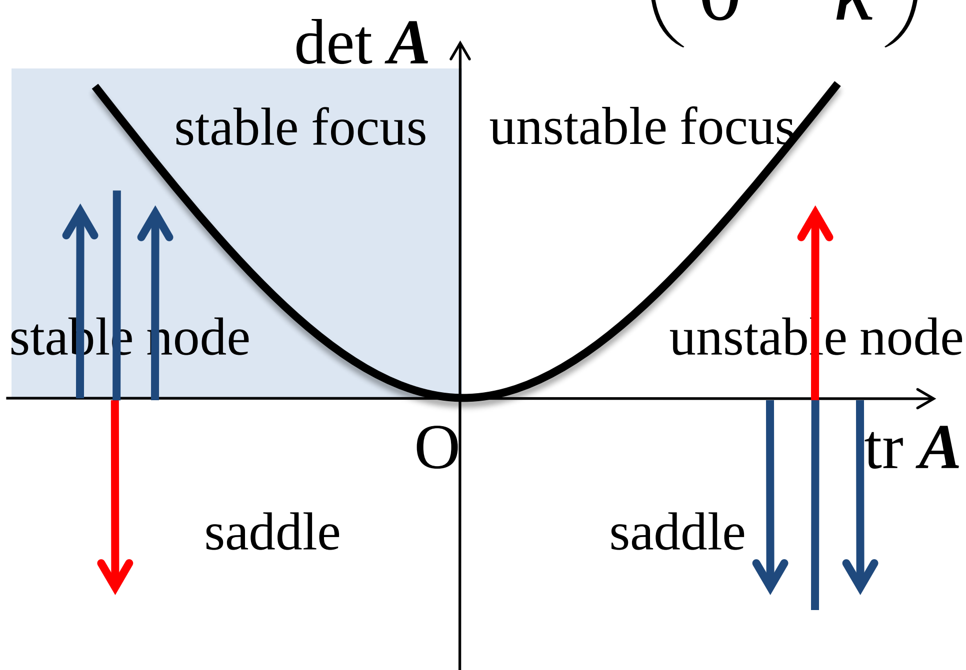
$u = \pm\sqrt{\alpha},\ v = 0\ \ (\alpha \geq 0)$ まわりで

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -2\alpha & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$

$u = 0,\ v = 0$ まわりで

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$

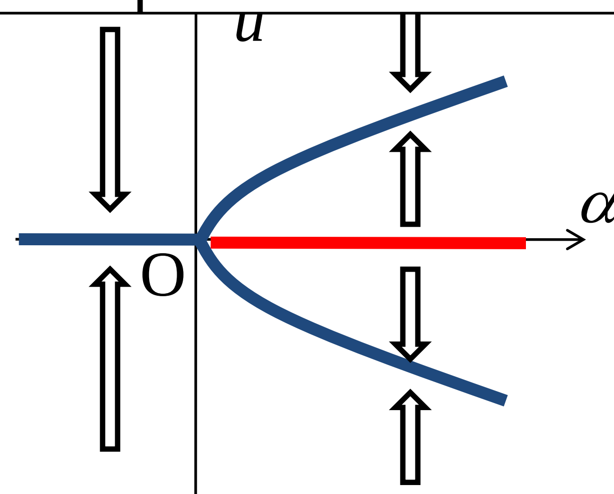




$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \alpha u - u^{3}$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

$k = -20$



$k = 20$

- 安定性交替分岐

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \alpha u - u^2$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

固定点：

$$u = 0,\ \lambda$$

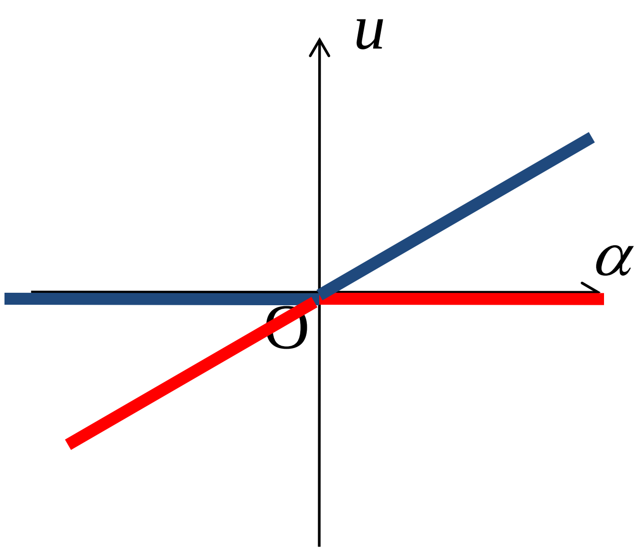
$$v = 0$$

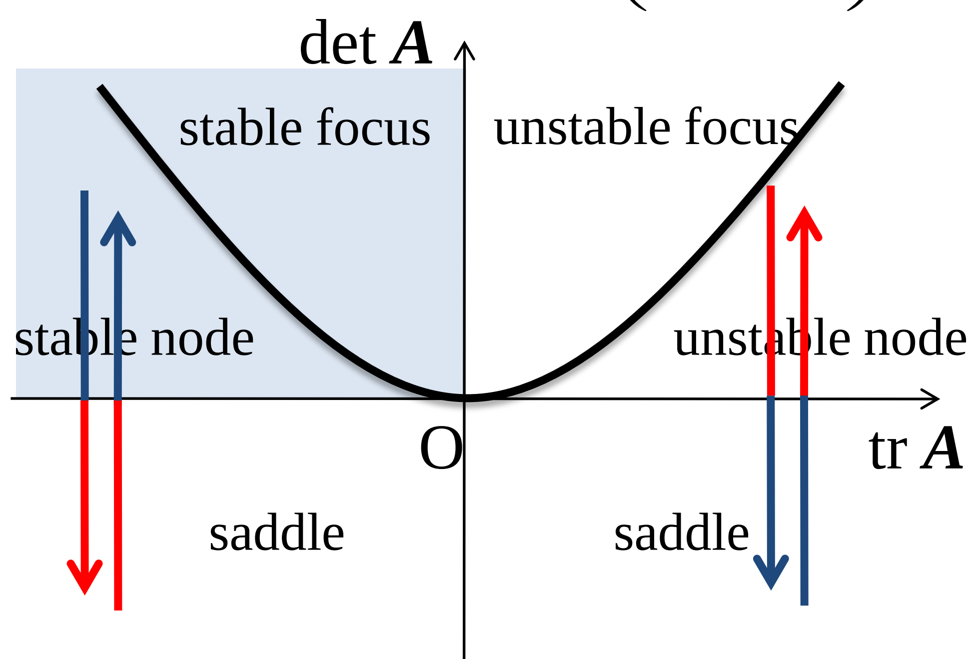
$u = \alpha,\ v = 0$ まわりで

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} -\alpha & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$

$u = 0,\ v = 0$ まわりで

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix}$$

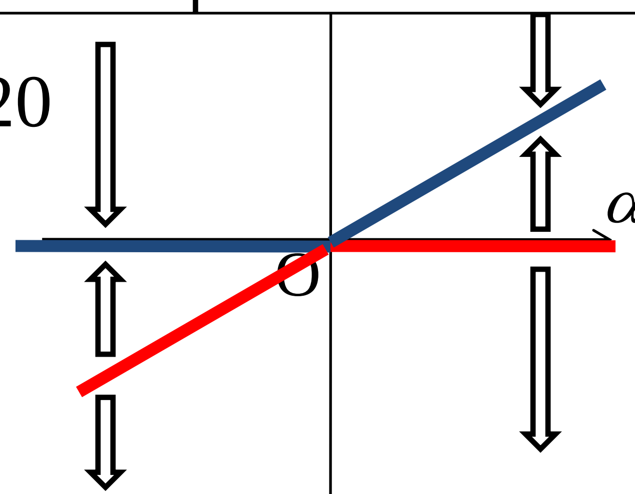




$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = -\alpha u + u^3$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = kv$$

$k = -20$



$k = 20$

- ホップ分岐

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = -v + \alpha u - \left(u^2 + v^2\right)\left(u - \beta v\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = u + \alpha v - \left(u^2 + v^2\right)\left(v + \beta u\right)$$

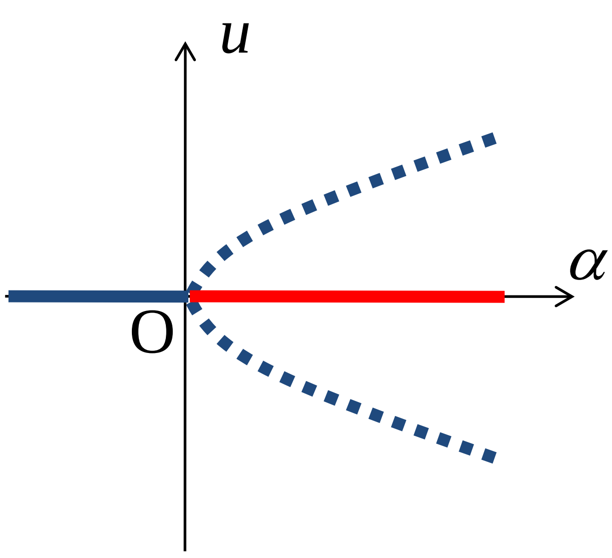
固定点：

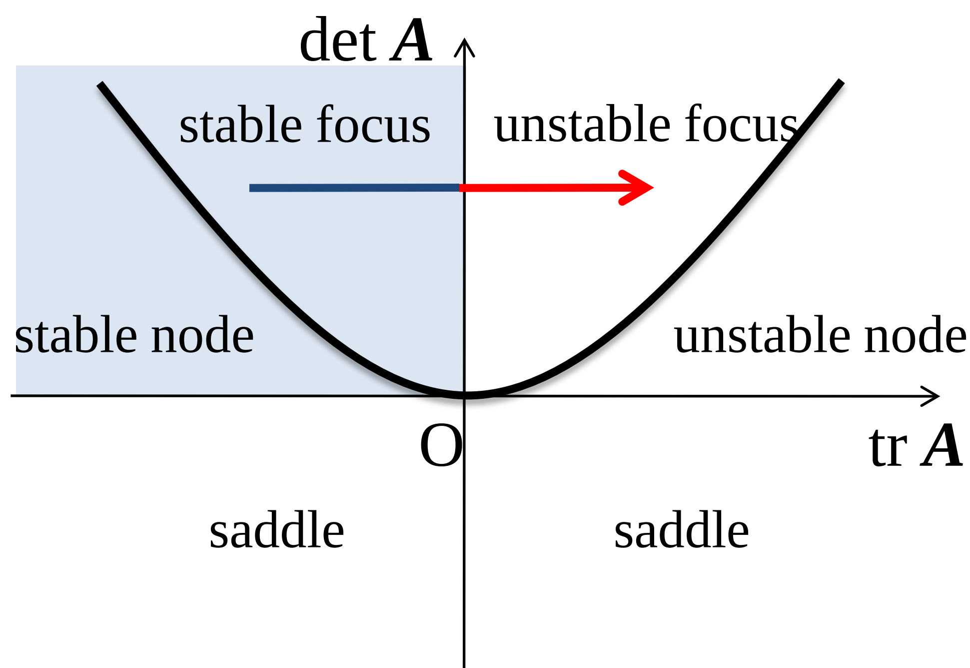
$$u = 0 \quad v = 0$$

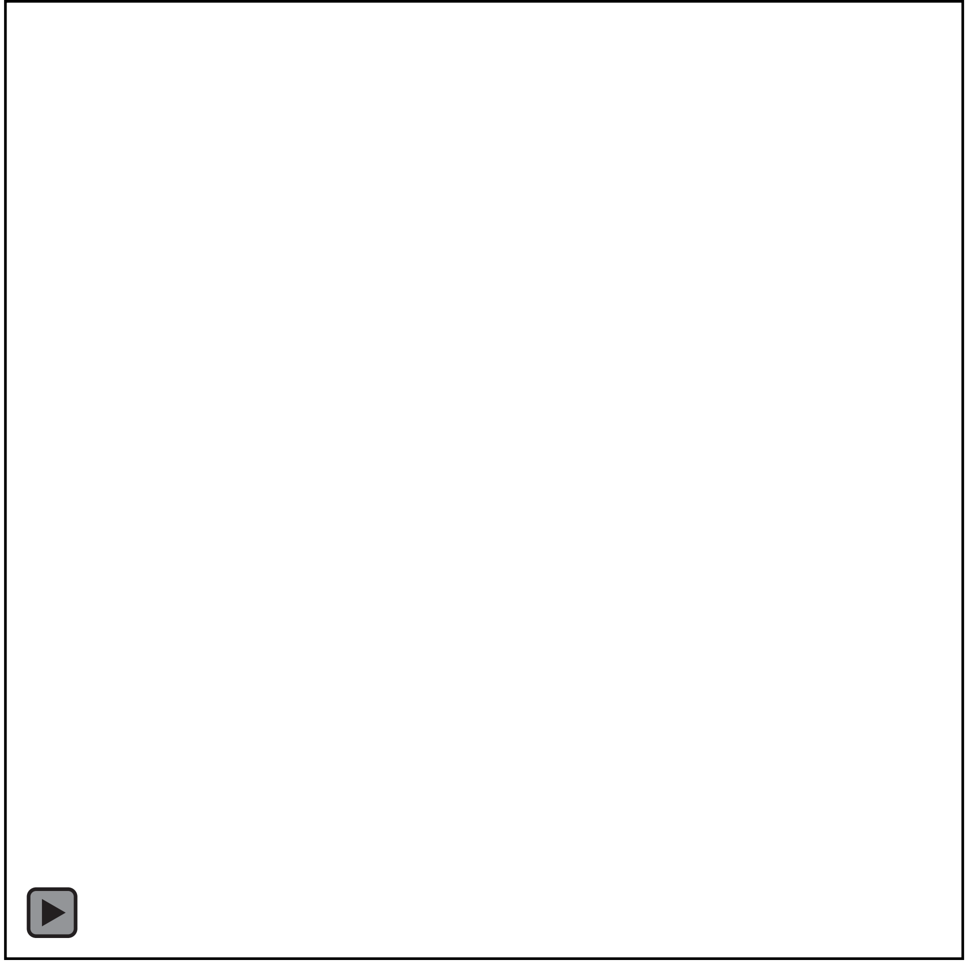
$u = 0,\ v = 0$ まわりで

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \alpha & -1 \\ 1 & \alpha \end{pmatrix}$$

$$\lambda = \alpha \pm i$$



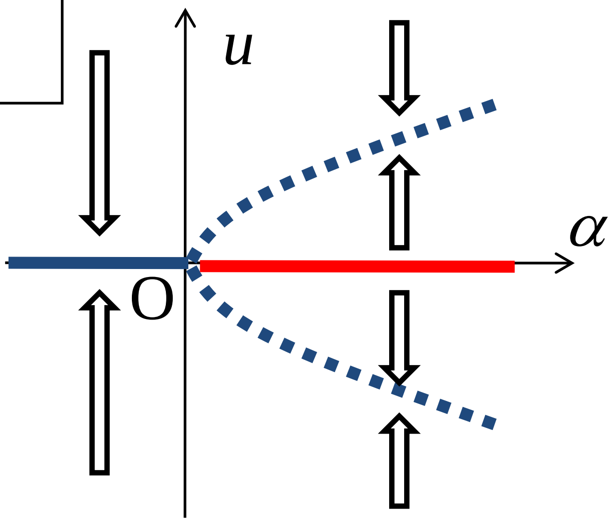




$$\beta = 0$$

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = -v + \alpha u - \left(u^2 + v^2\right)\left(u - \beta v\right)$$

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = u + \alpha v - \left(u^2 + v^2\right)\left(v + \beta u\right)$$



非線形振動子と同期現象

Stuart-Landau方程式

$$
\begin{cases}
\dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = ax - \omega y - \left(x^2 + y^2\right)\left(x - by\right) \\
\dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = ay + \omega x - \left(x^2 + y^2\right)\left(y + bx\right)
\end{cases}
$$

$$
\begin{cases}
\dfrac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = ar - r^3 \\
\dfrac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \omega
\end{cases}
$$

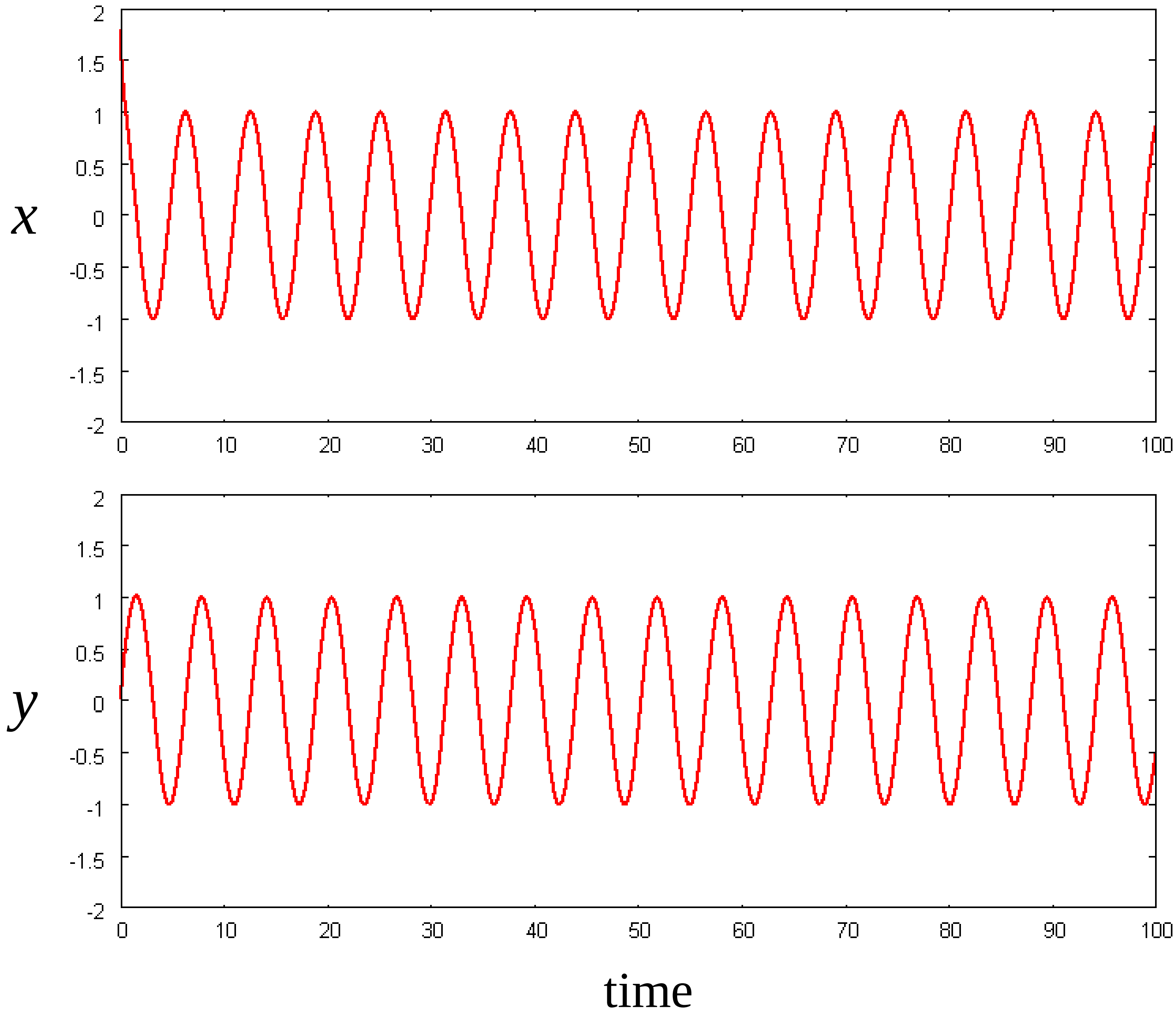
$$r^2 = x^2 + y^2$$

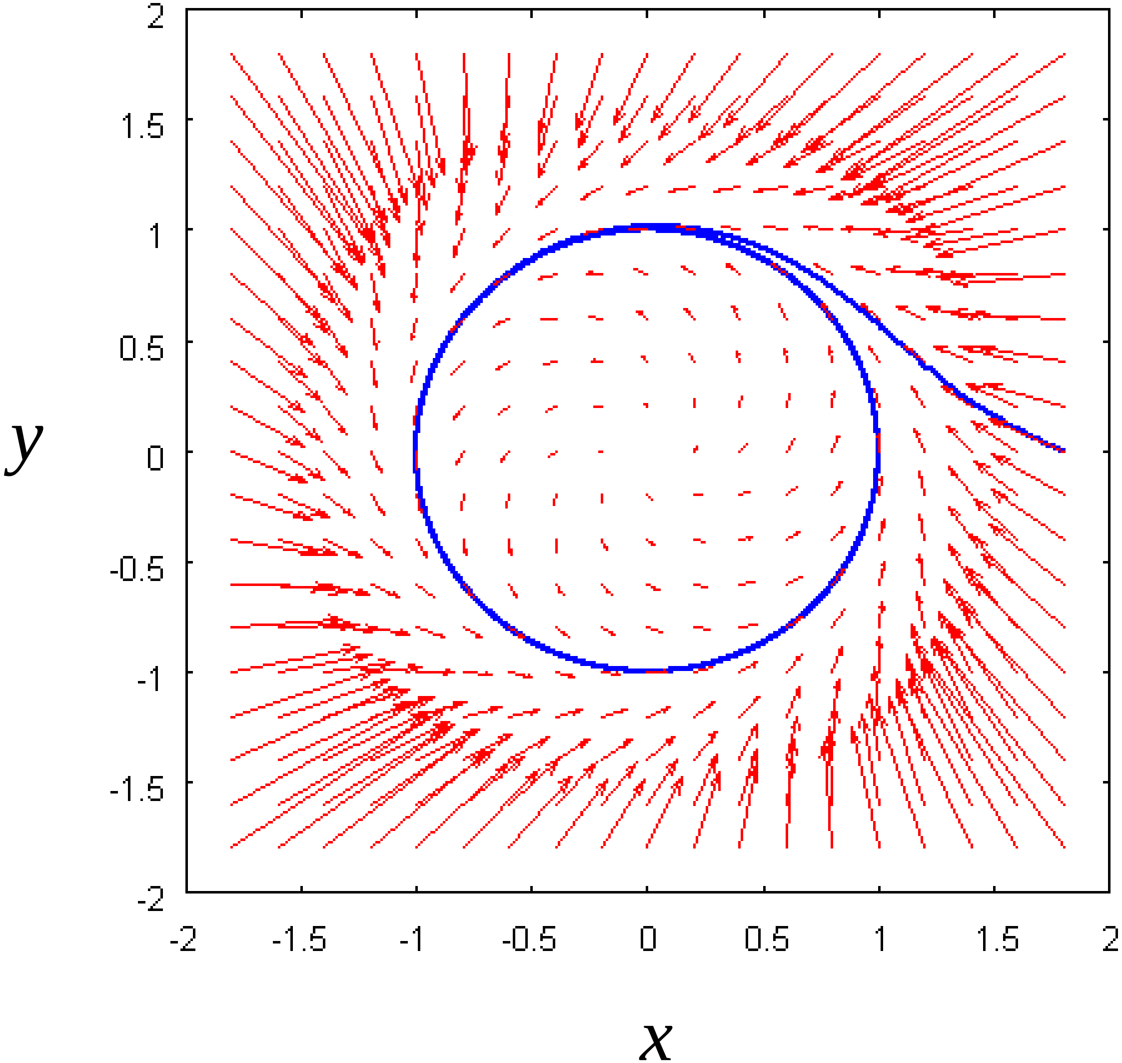
$$\frac{y}{x} = \tan\theta$$

$$a = 1$$

$$b = 0$$

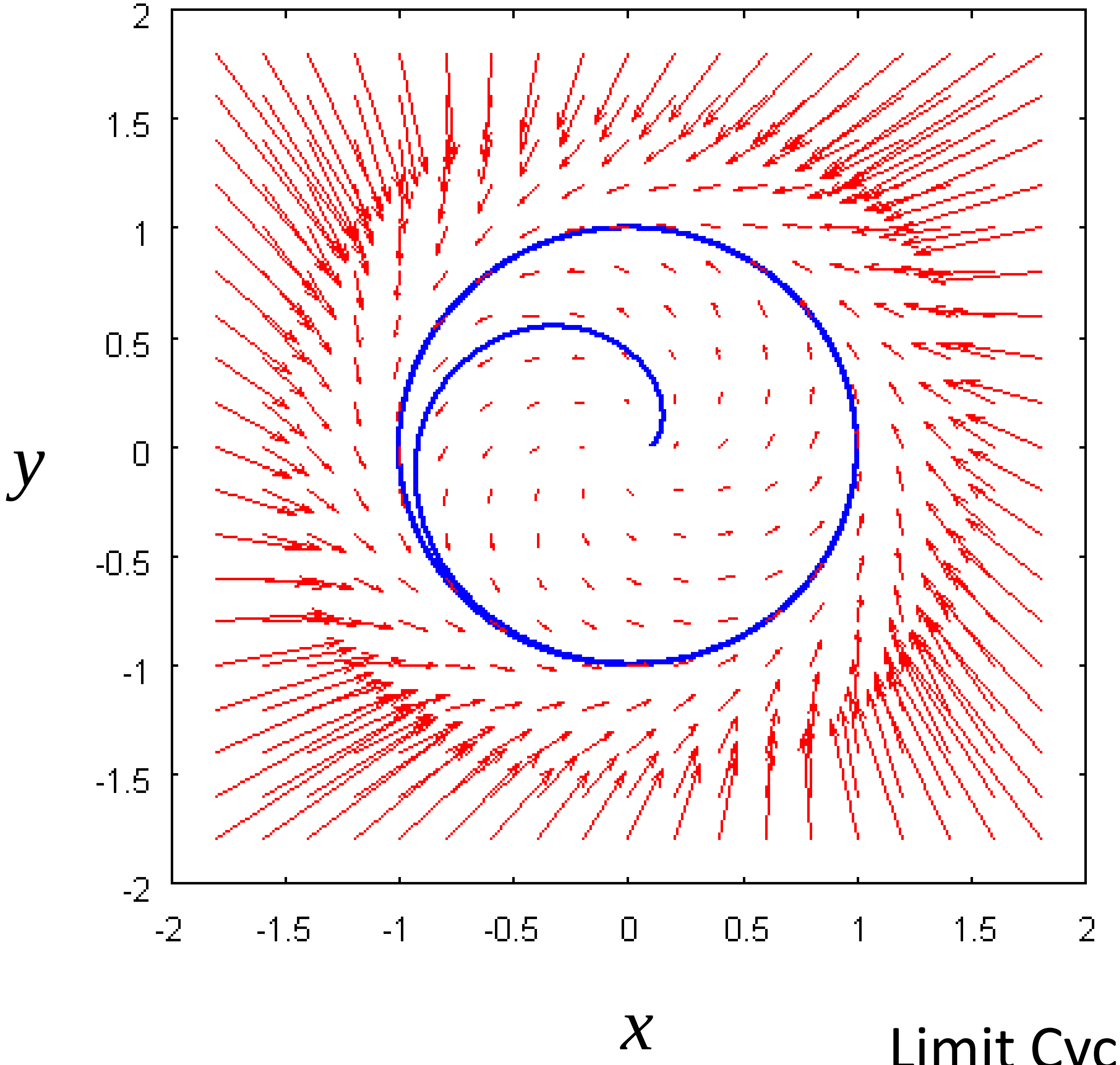
Stuart- Landau方程式の数値計算（プログラム）


x
y
time
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
100



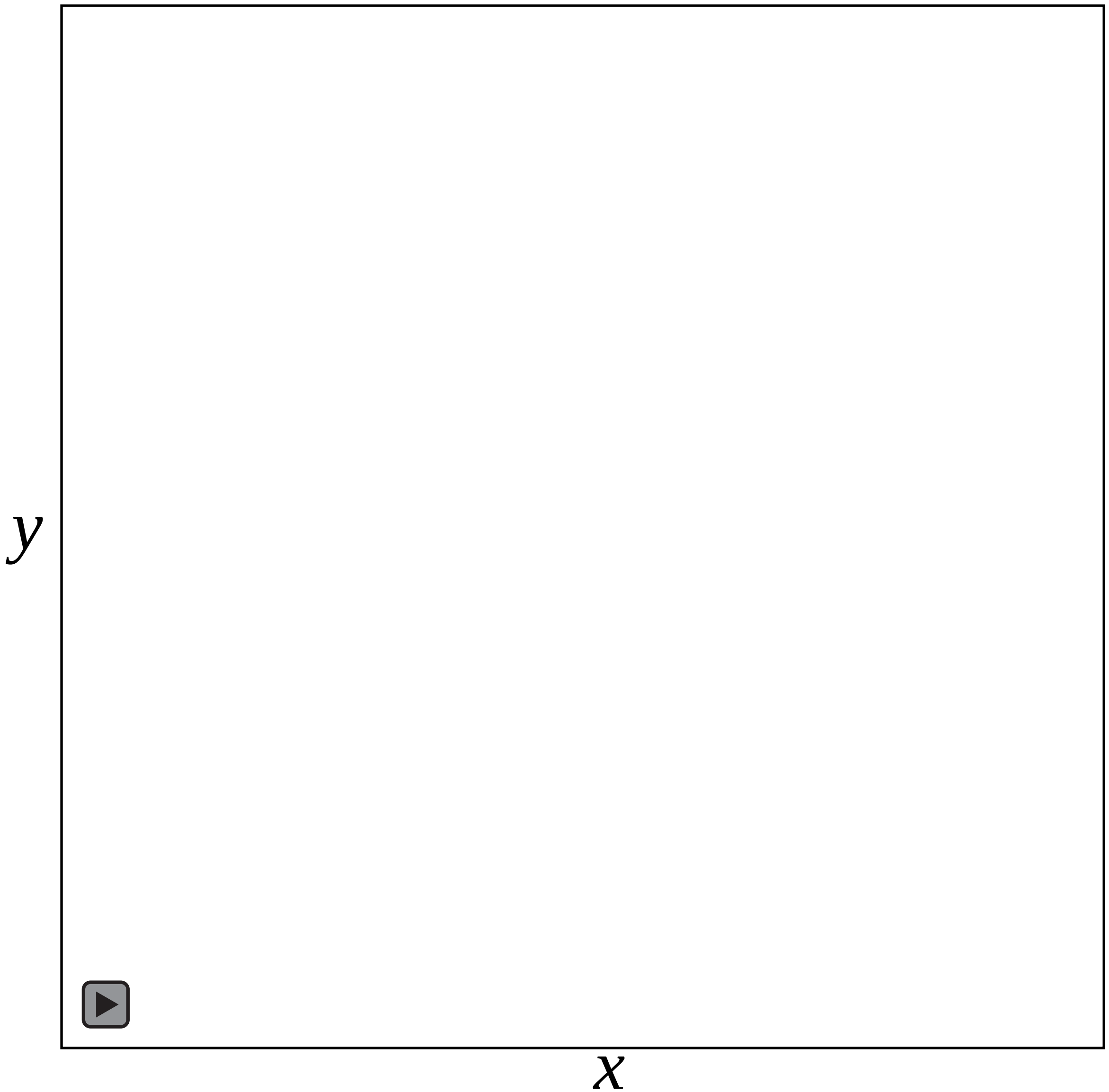
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2
y
x

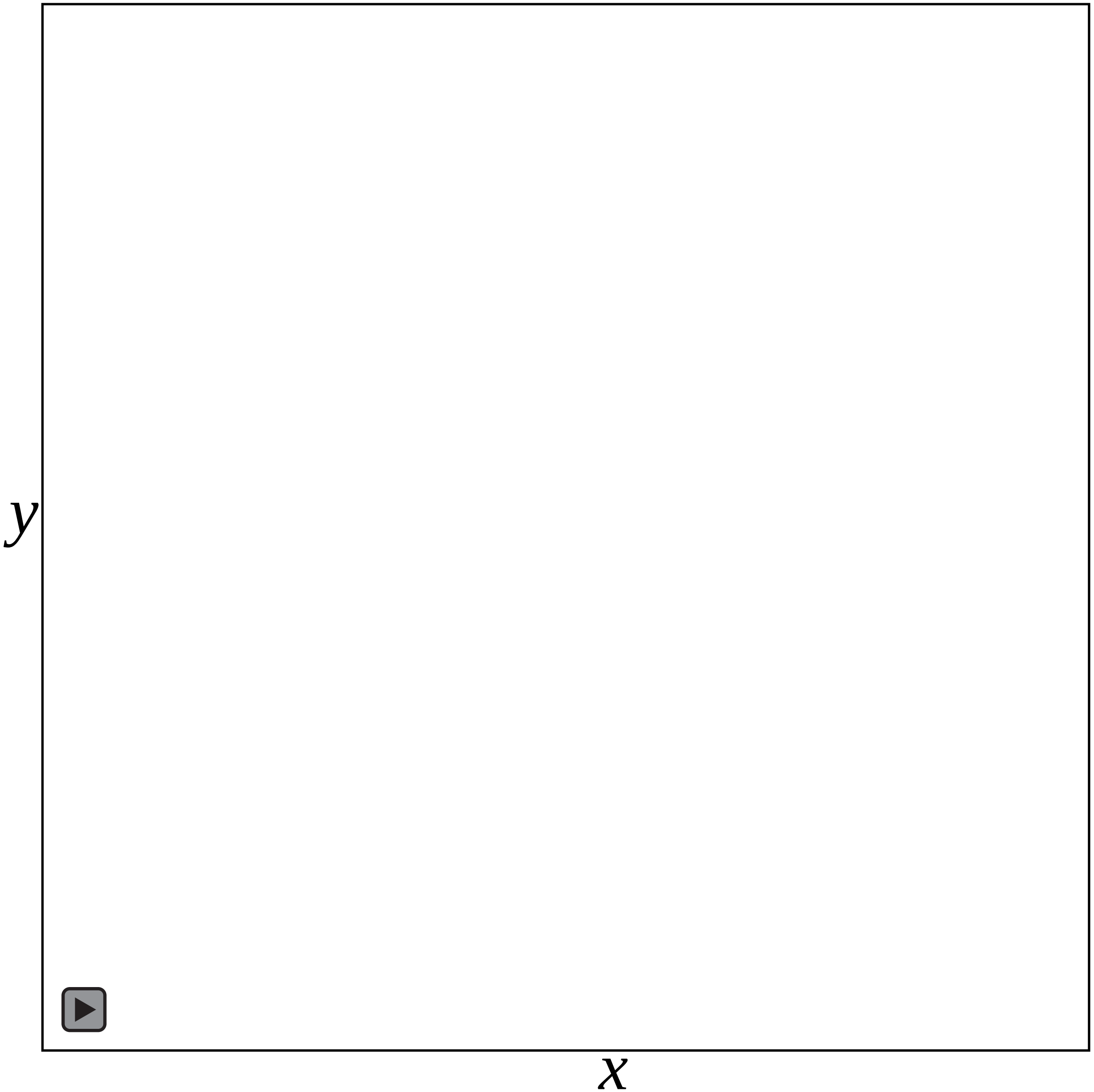
初期値を変えても

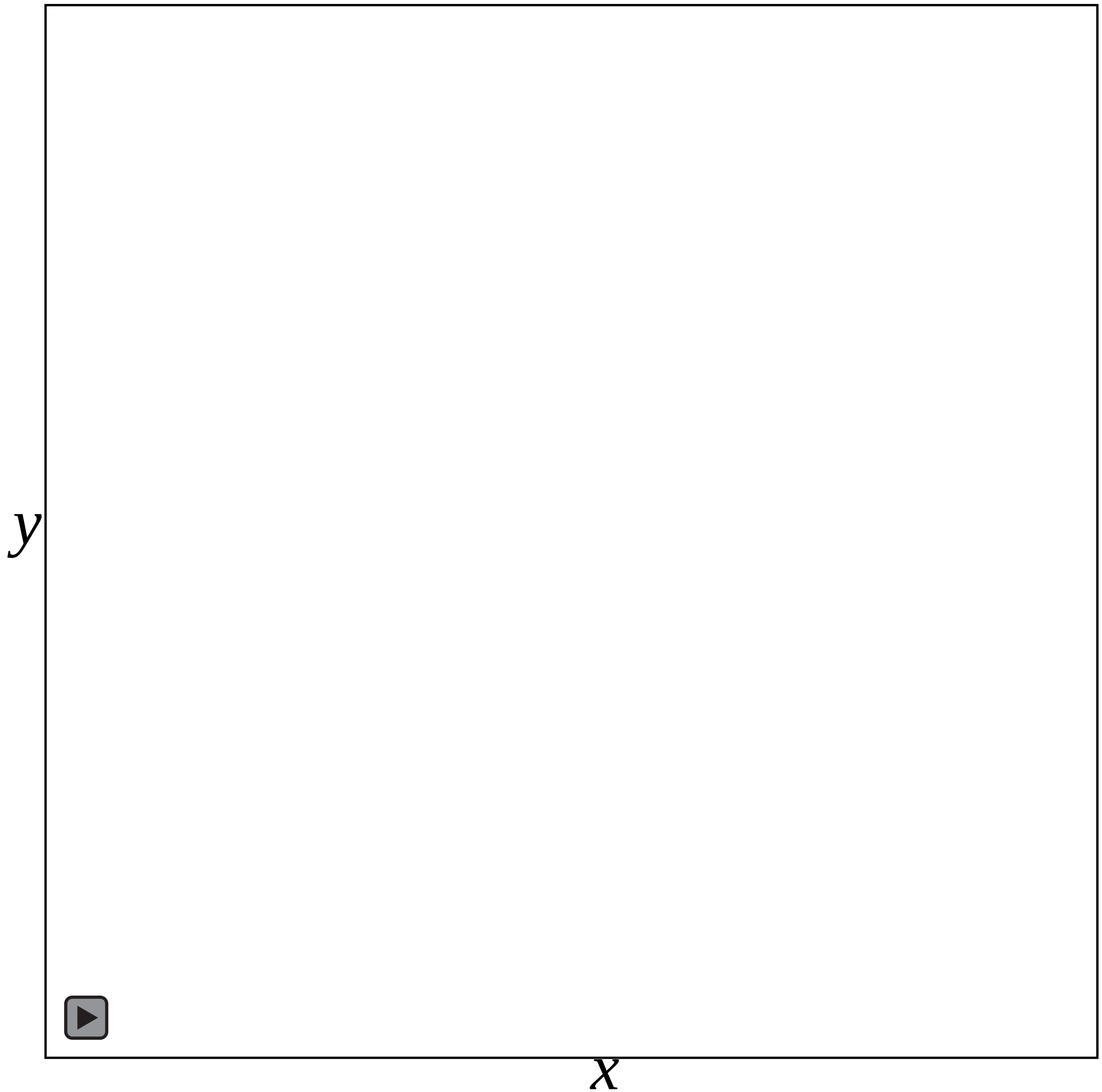


Limit Cycle (極限軌道)

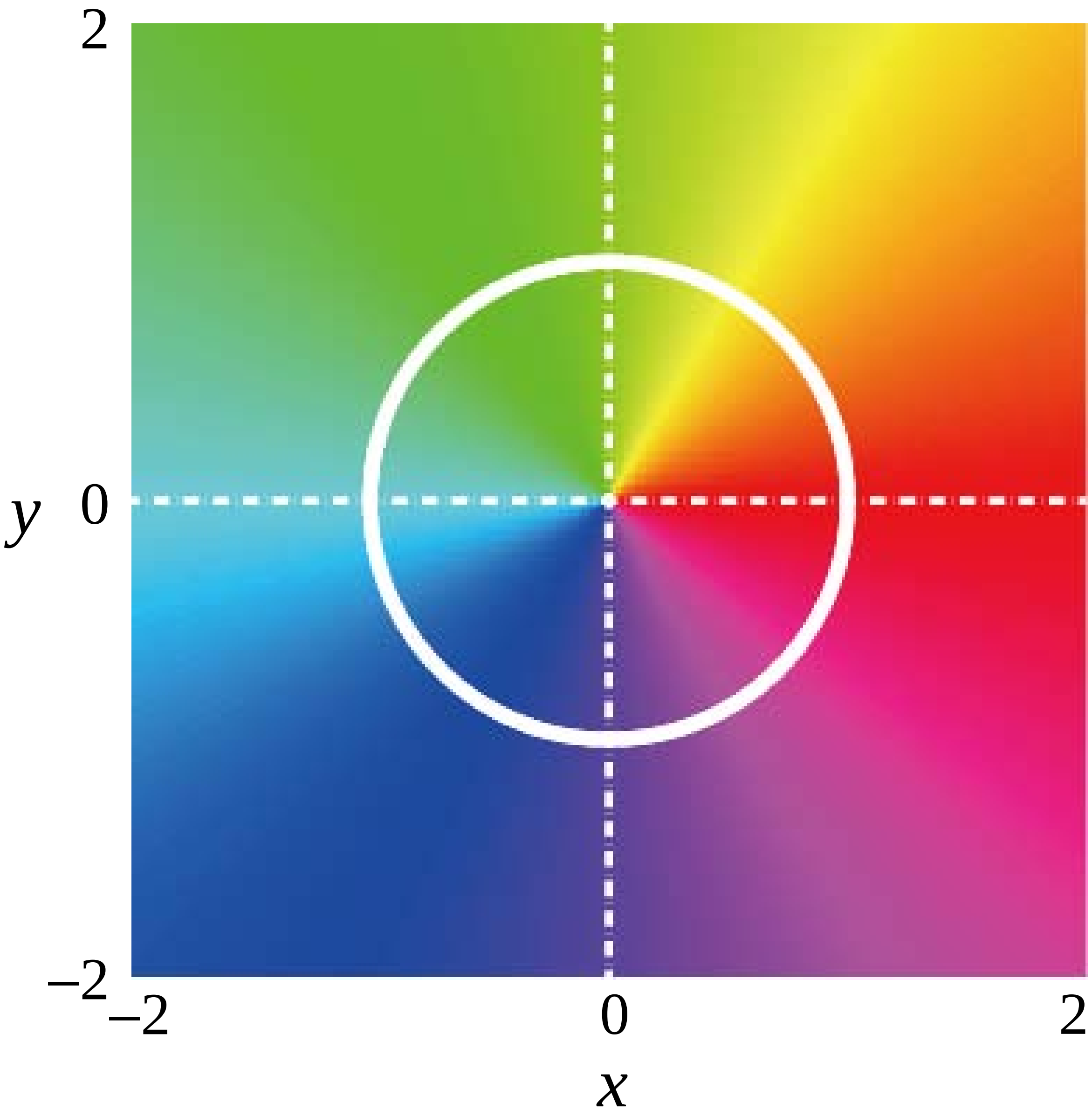
リミットサイクル上の運動




y
x


y
x

等位相面



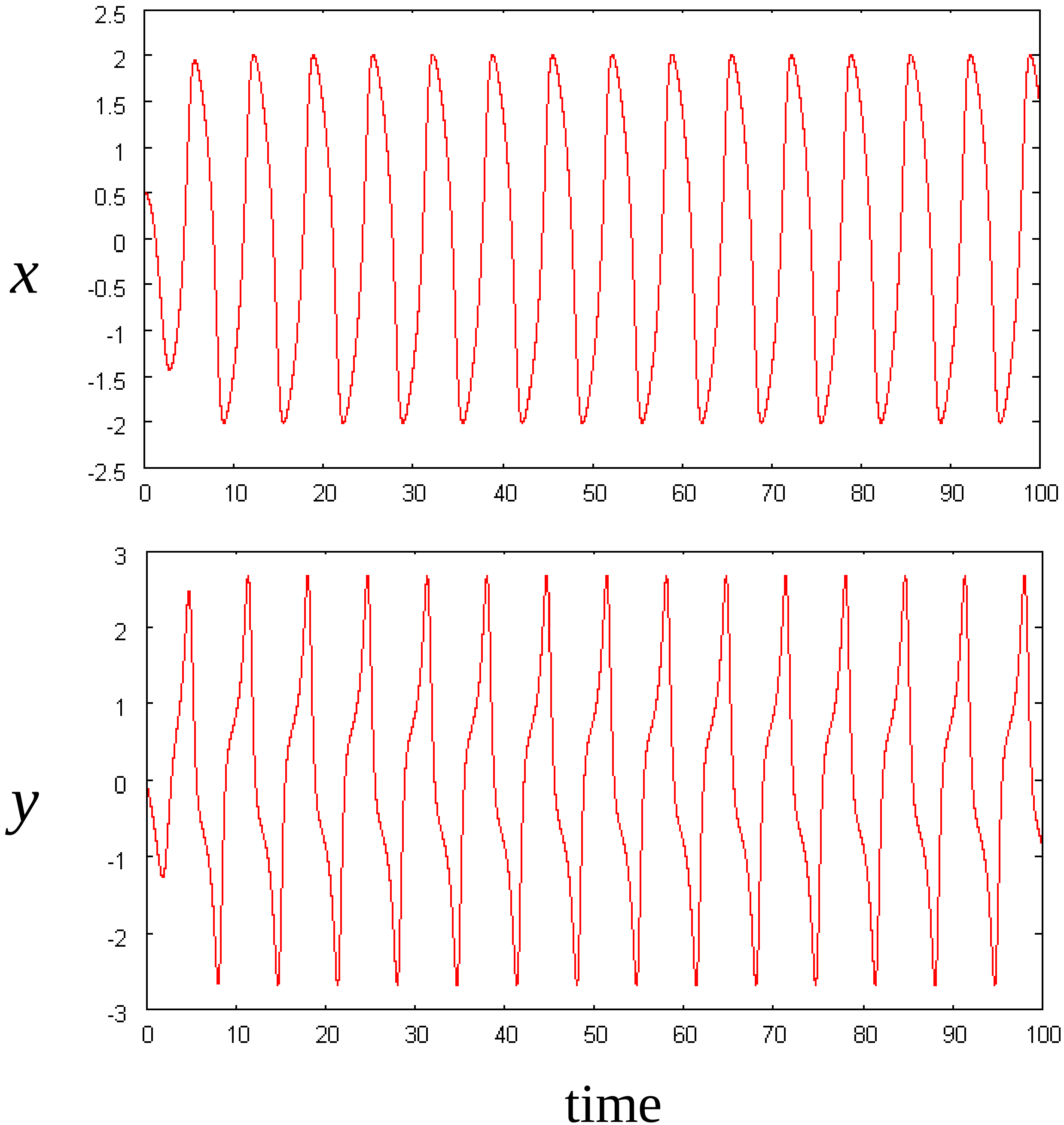
$$\theta = \arctan\left(\frac{y}{x}\right)$$

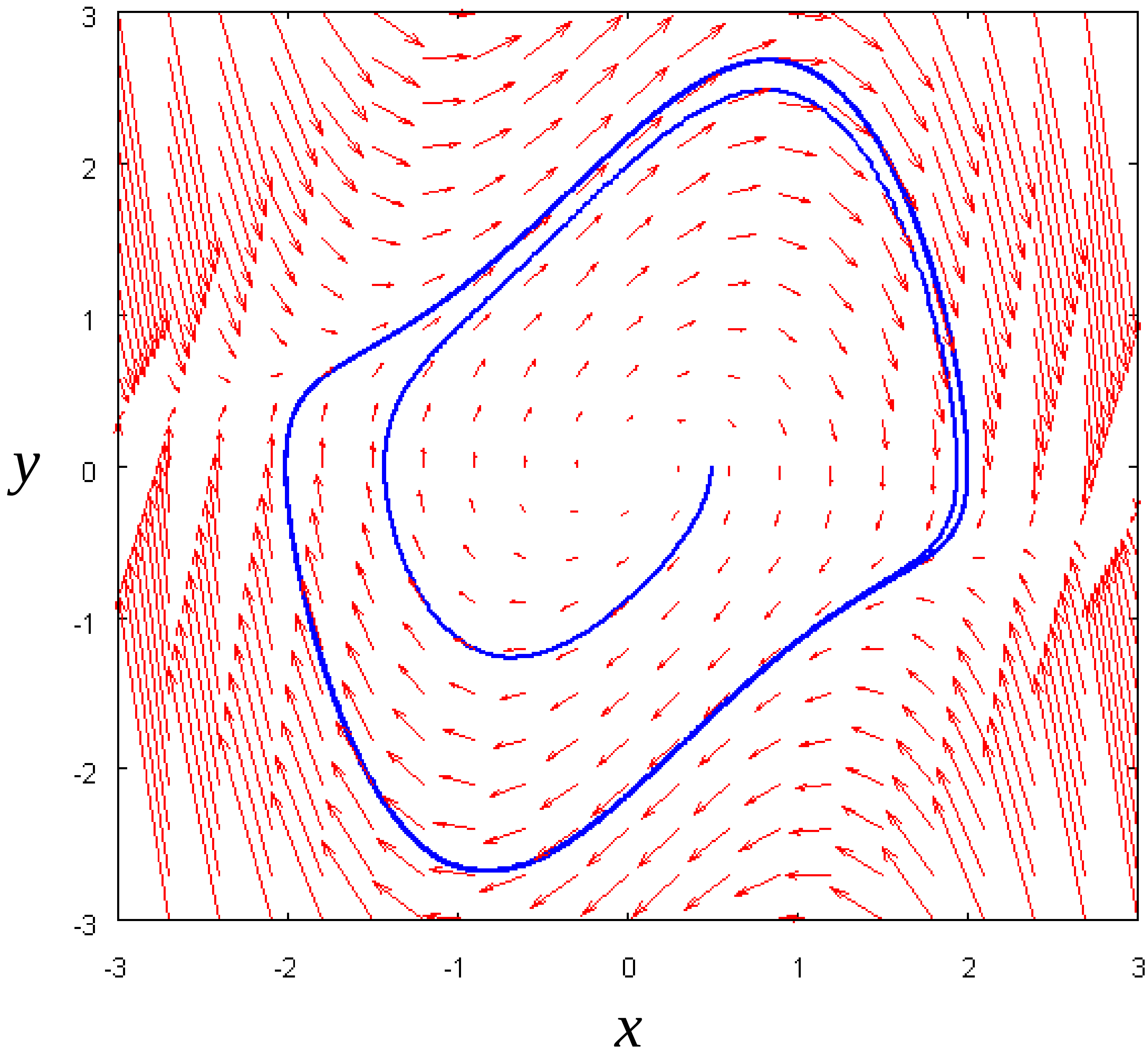
van der Pol 方程式　～　丸くなくても･･･

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \alpha\left(x^2 - 1\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + x = 0$$

$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = y \\[2ex] \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = -\alpha\left(x^2 - 1\right)y - x \end{cases}$$

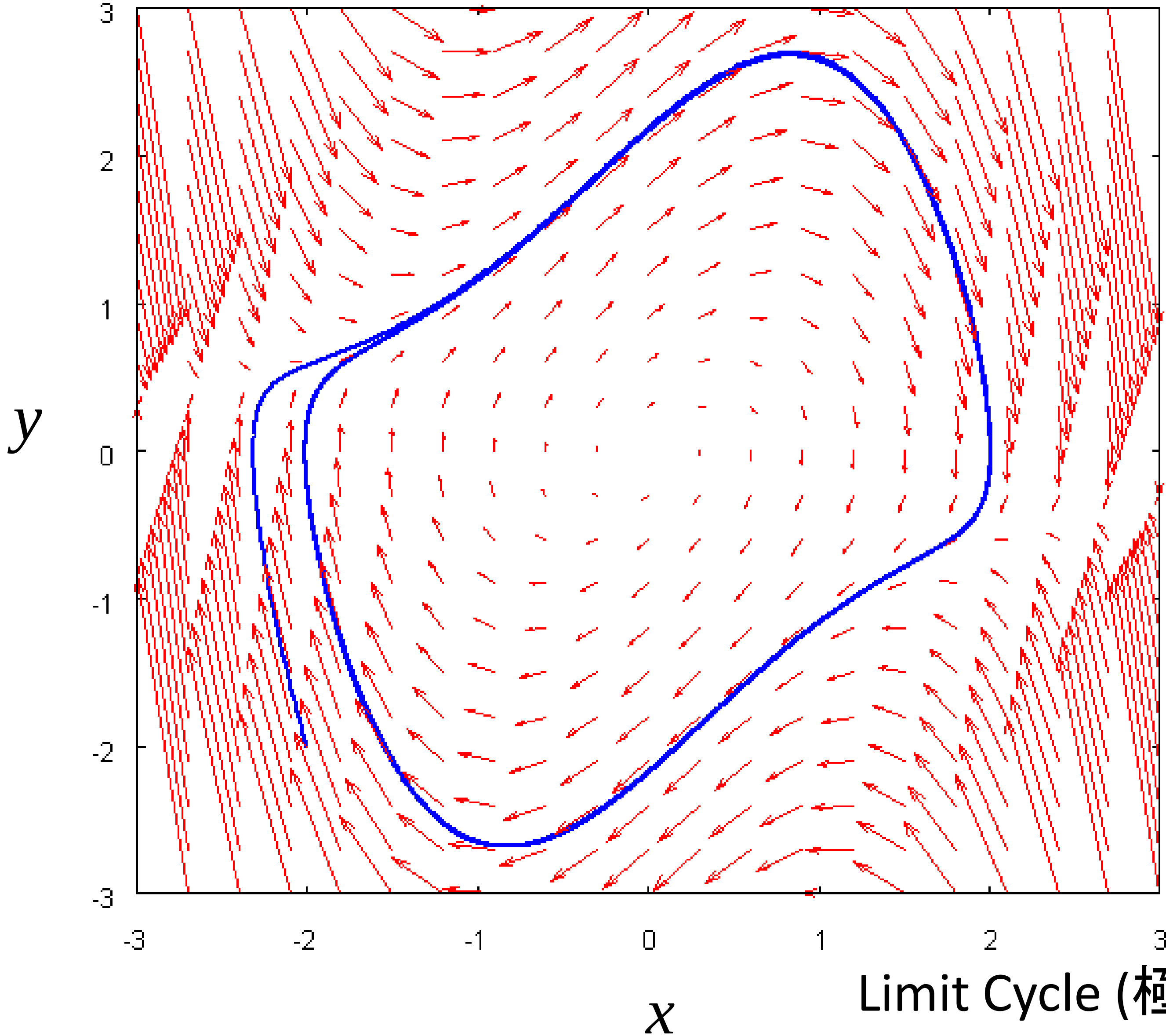
van der Pol 方程式の数値計算(プログラム)


x
y
time
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
-2
-2.5
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
100
3
2
1
0
-1
-2
-3
0
10
20
30
40
50
60
70
80
90
100

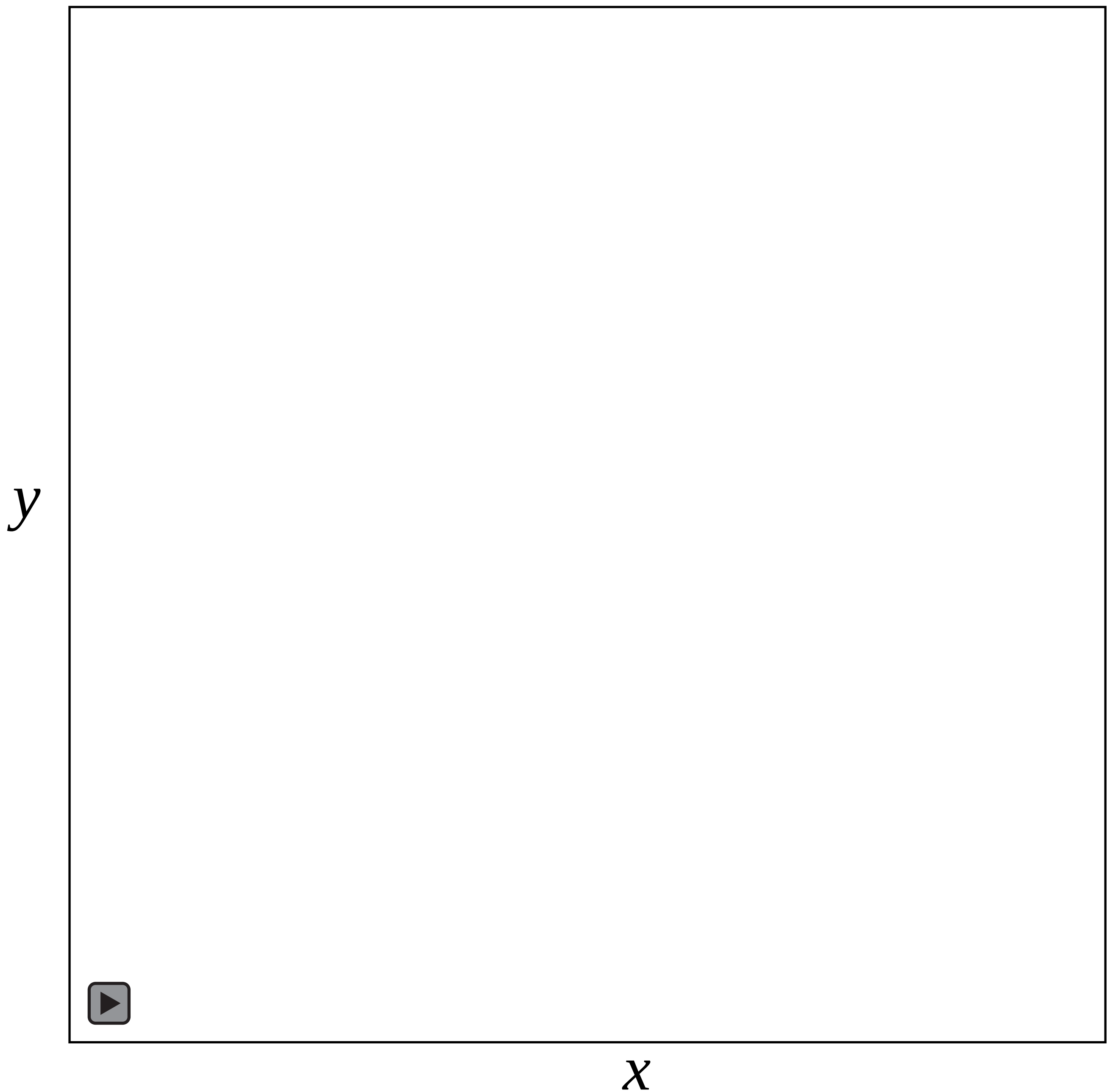


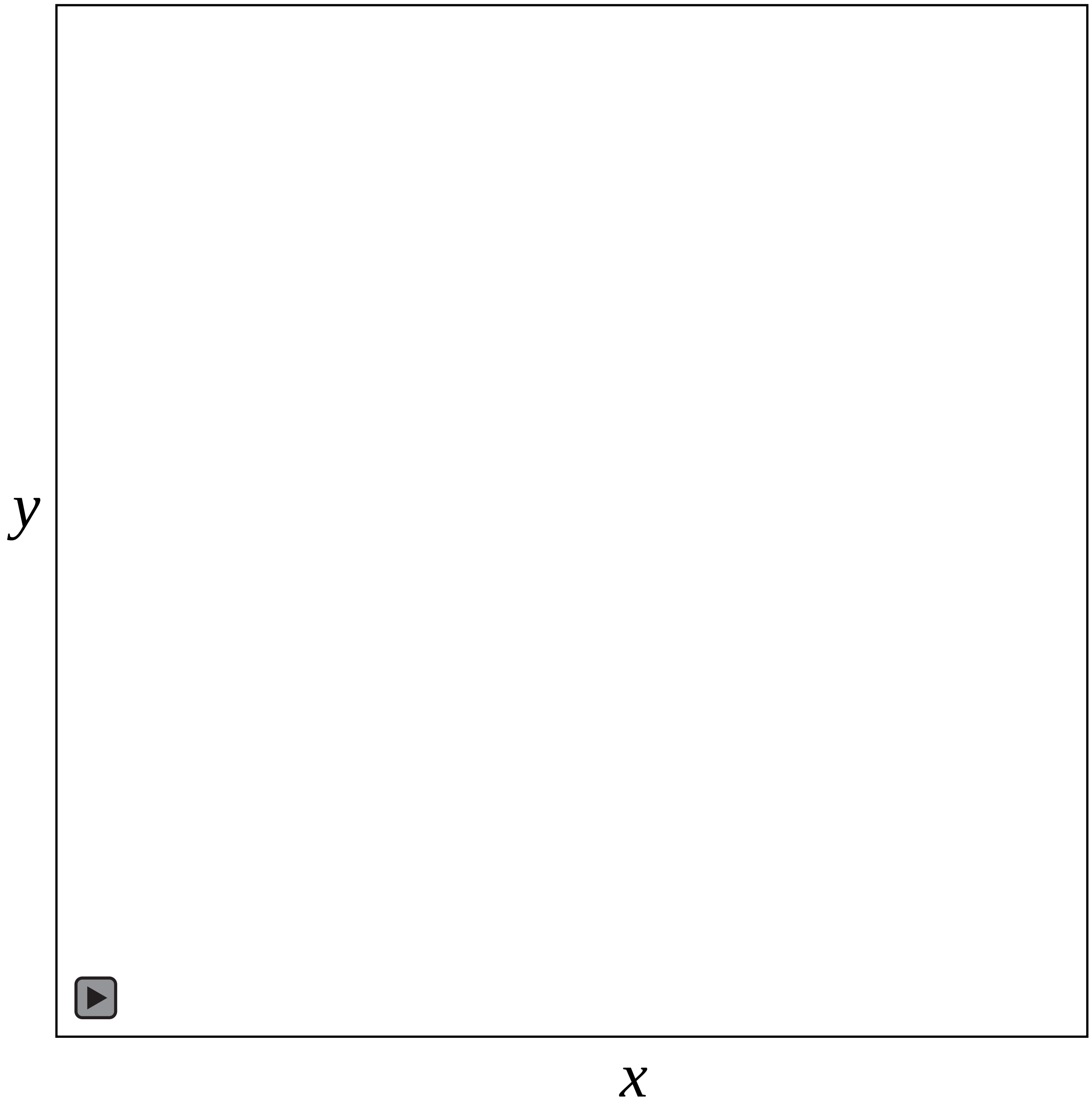
y
x
3
2
1
0
-1
-2
-3
-3
-2
-1
0
1
2
3

初期値を変えても

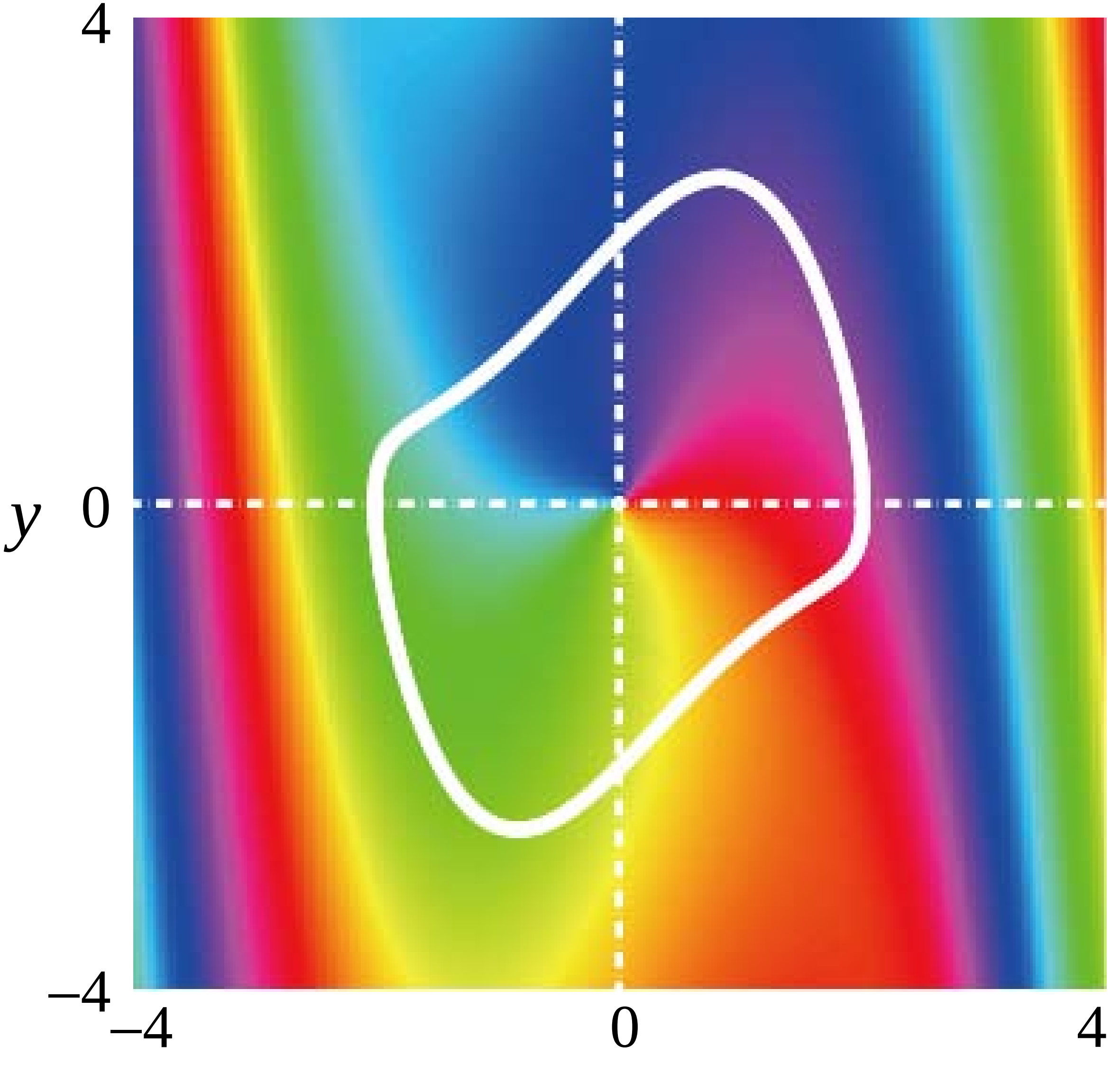


Limit Cycle (極限軌道)


y
x


y
x

等位相面



さまざまな非線形振動子

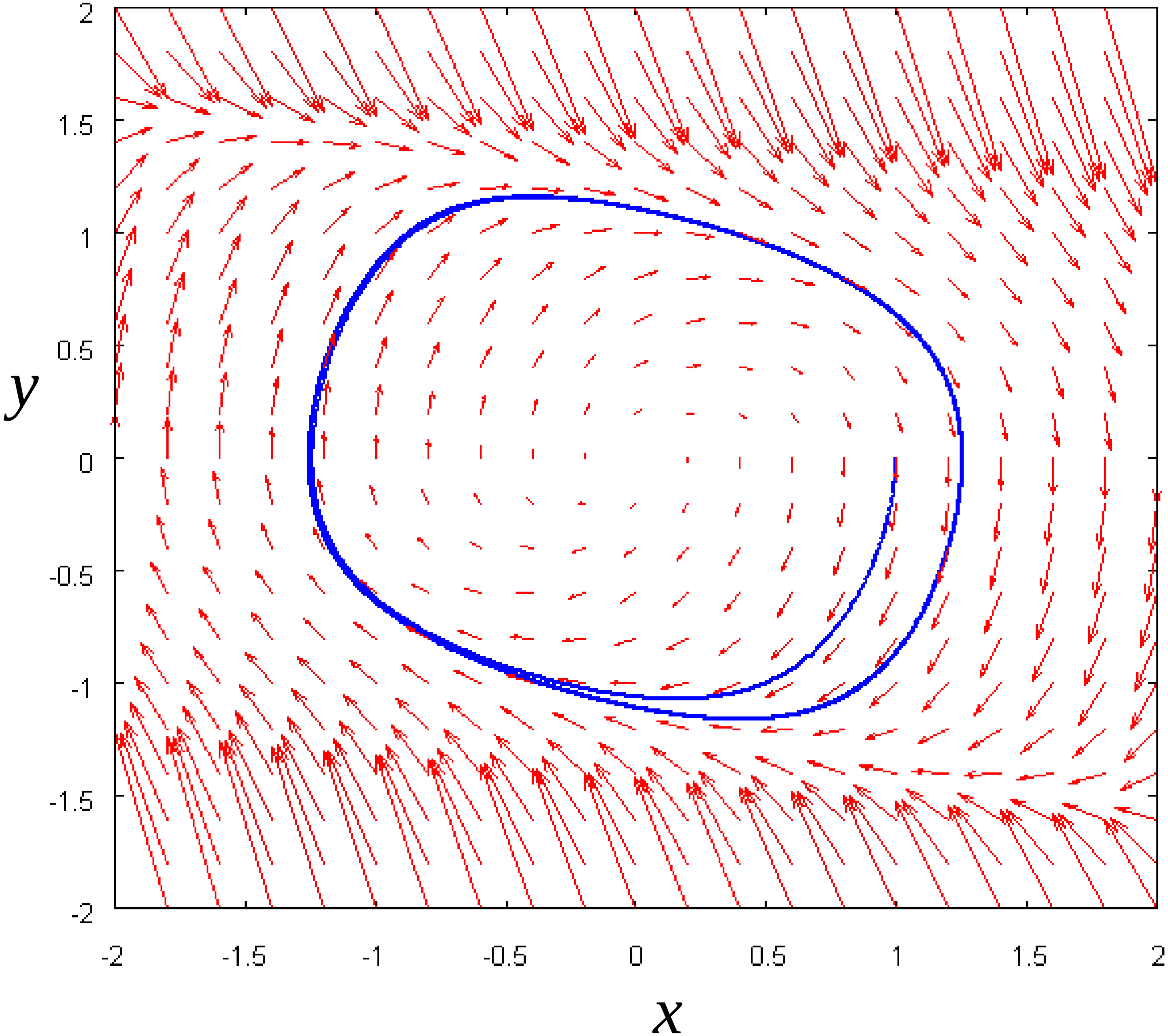
Rayleigh方程式

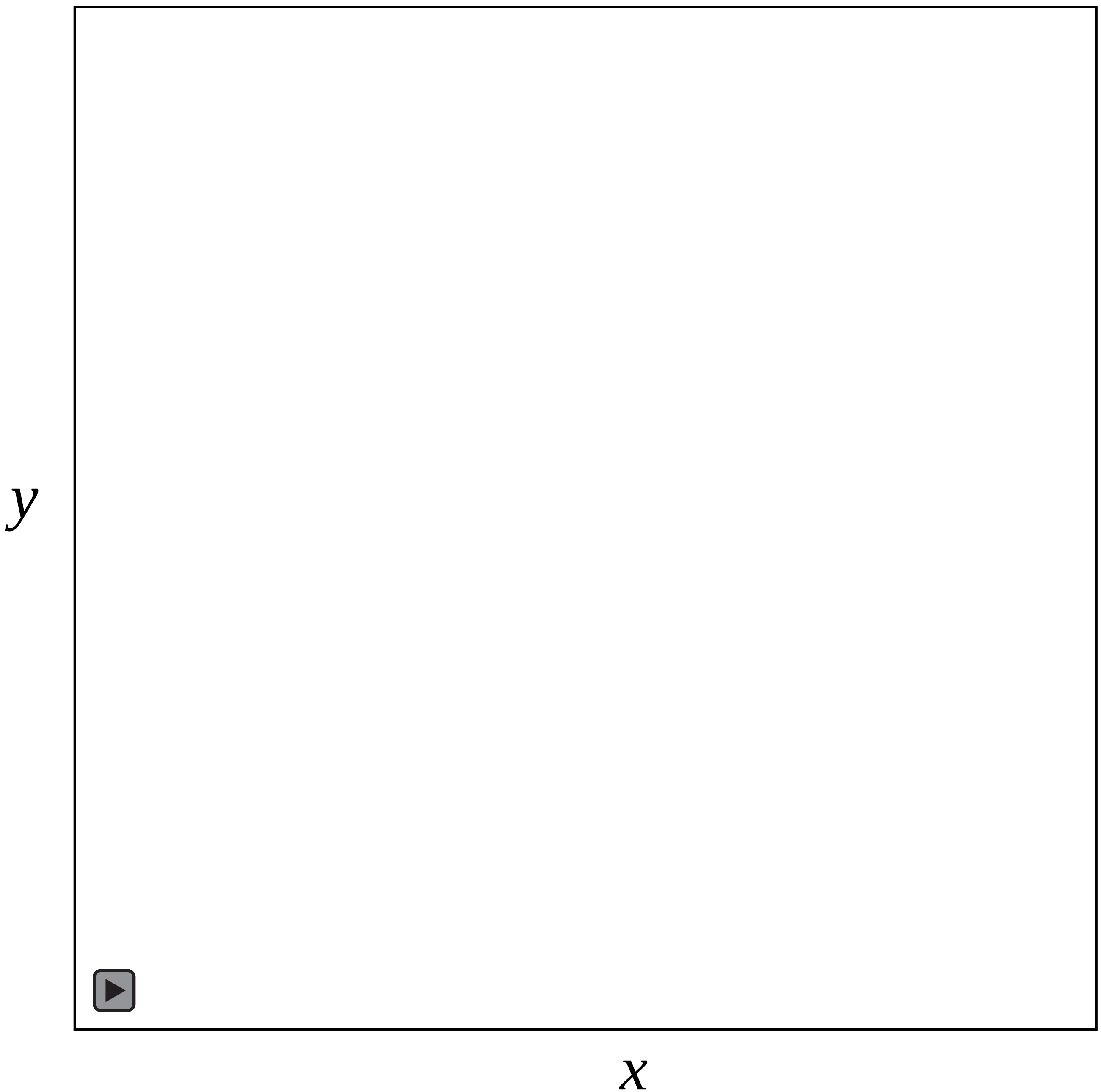
$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} + \alpha\left(\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 - 1\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + x = 0$$

FitzHugh-Nagumo方程式

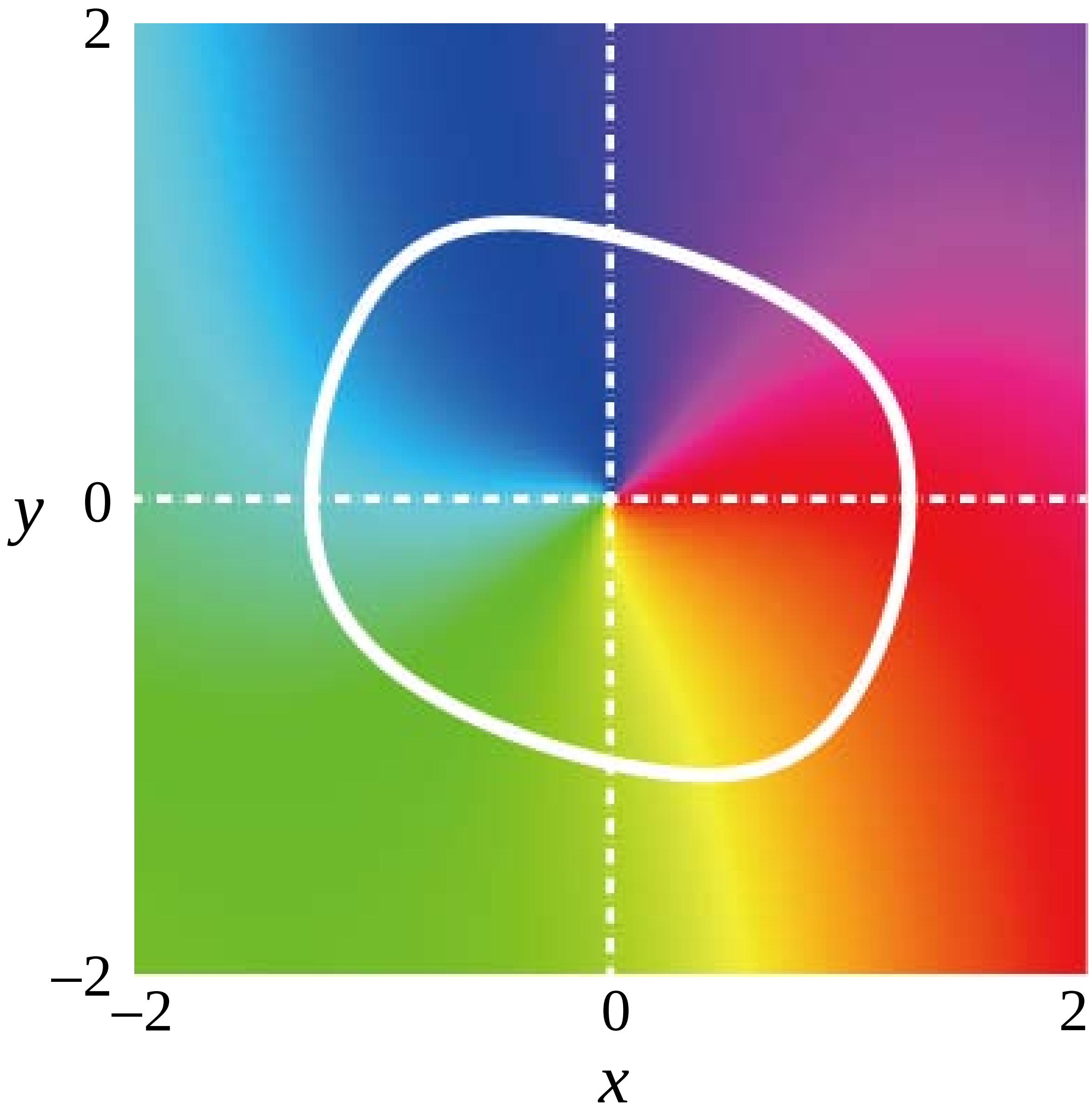
$$\begin{cases} \dfrac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \dfrac{1}{\varepsilon}\left(x - x^3 - y\right) \\ \dfrac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = x - y + b \end{cases}$$

Rayleigh方程式

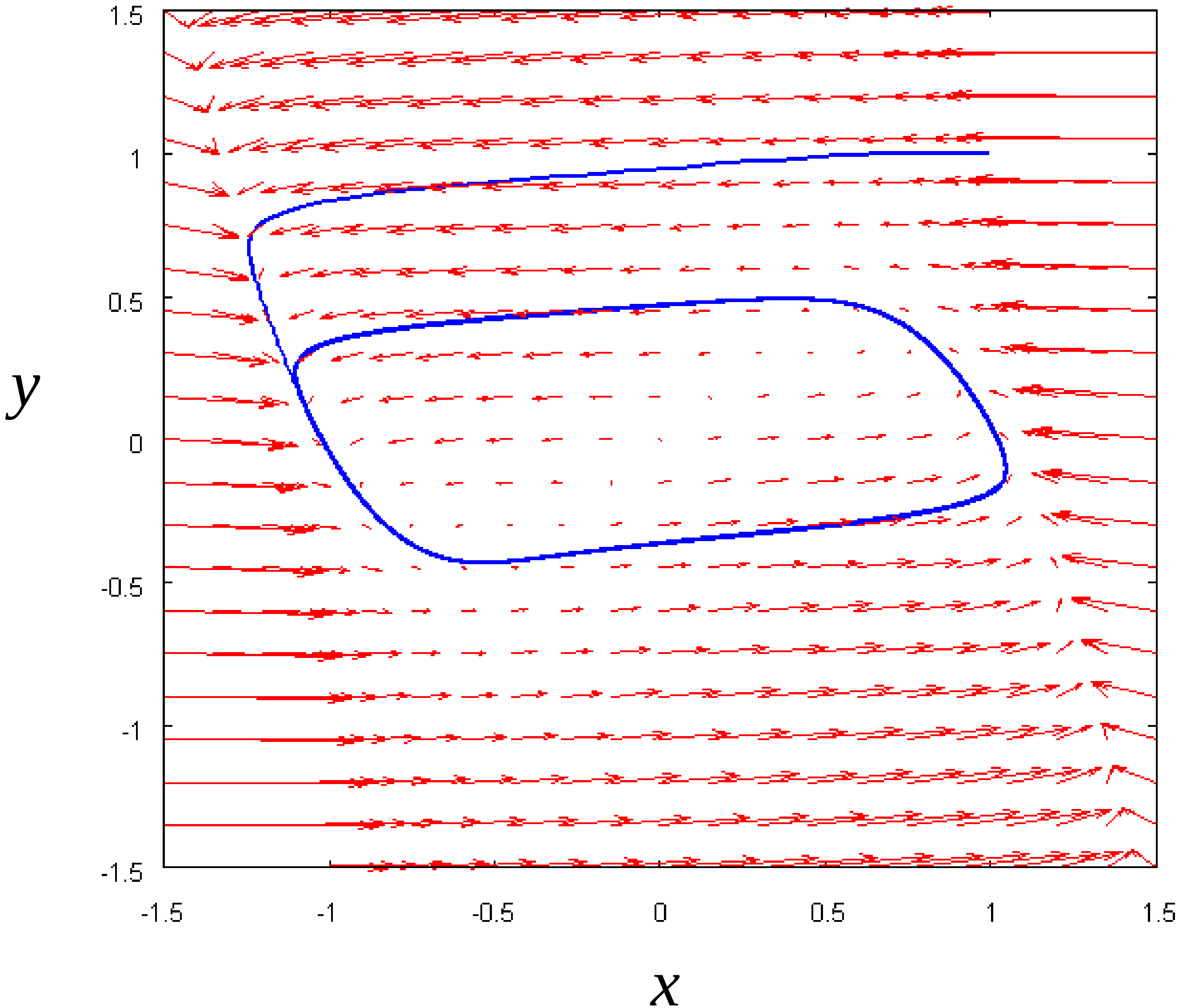


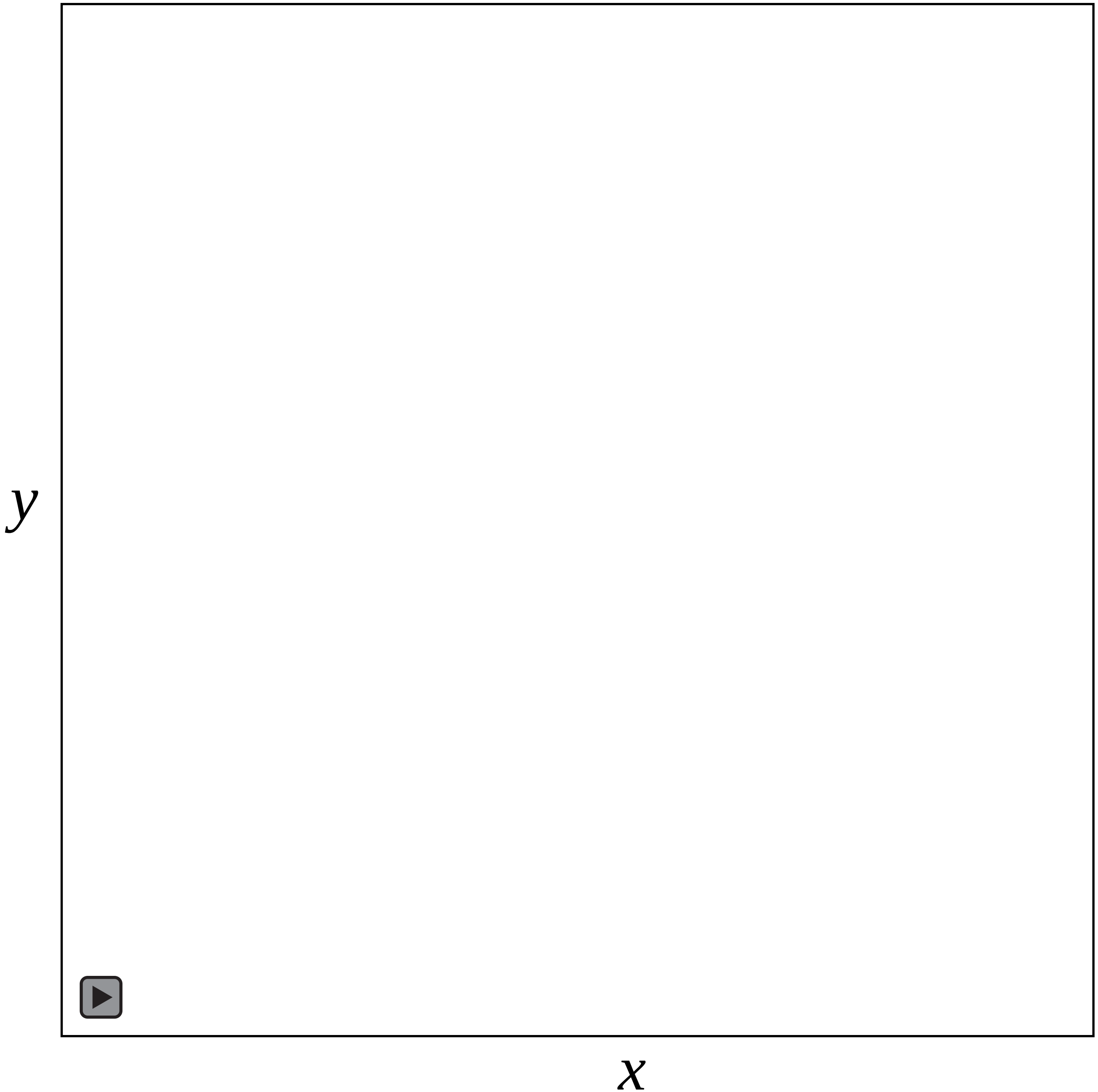

y
x

等位相面

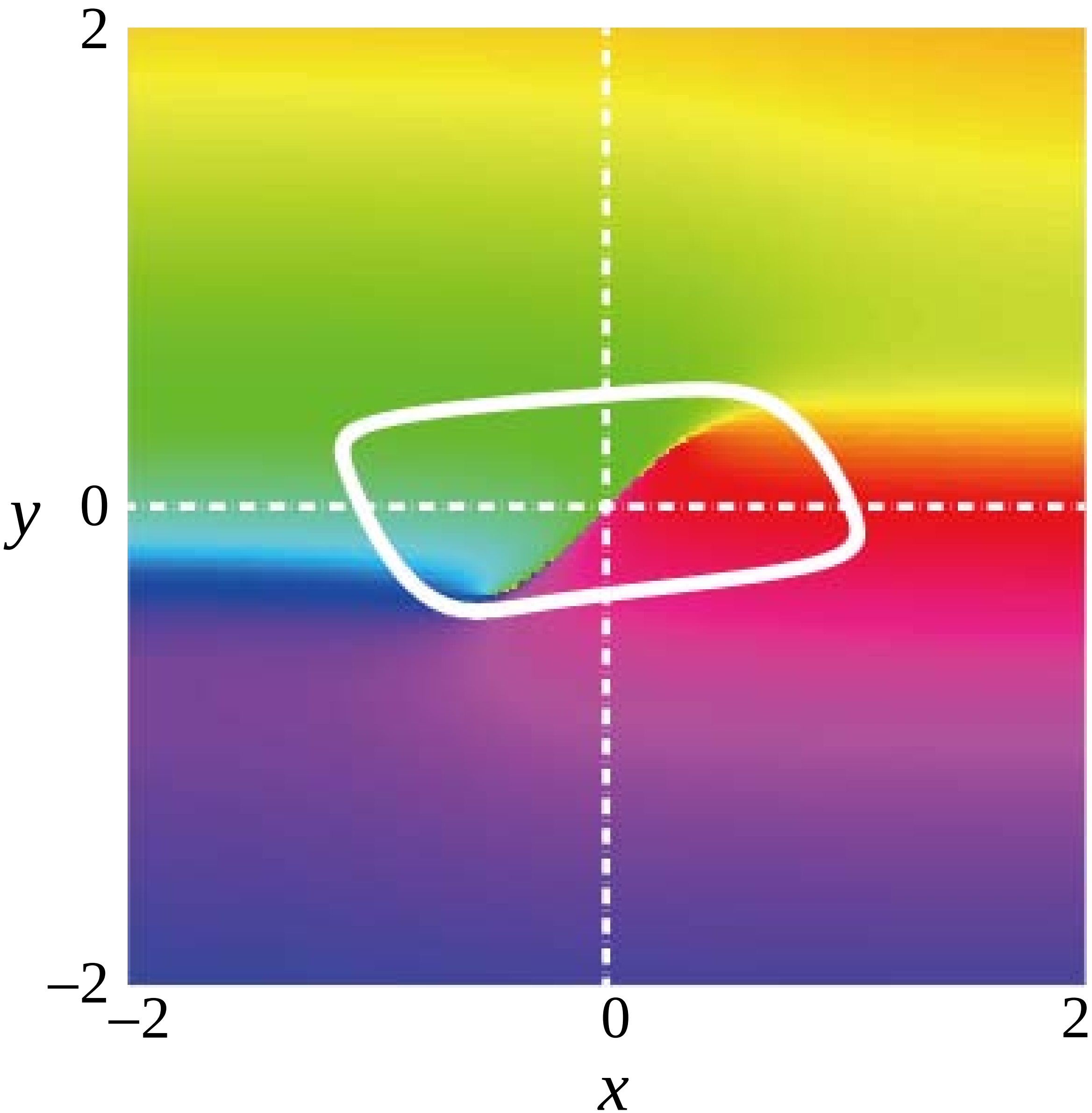


FitzHugh-Nagumo方程式



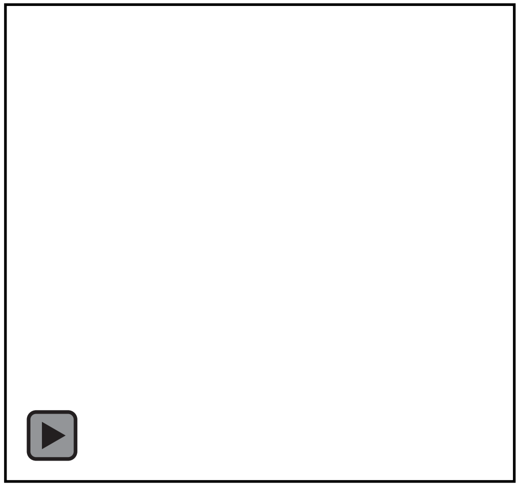

y
x

等位相面

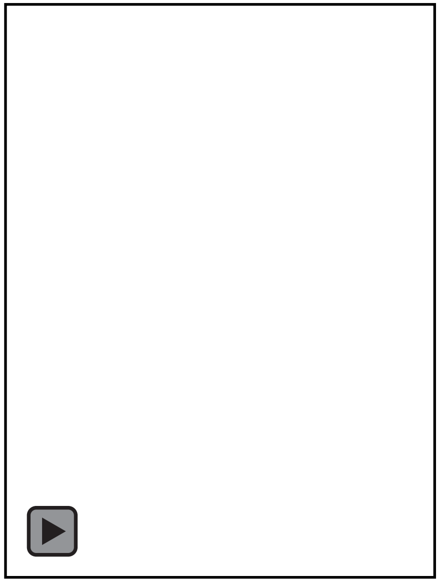


実験室で見られる時空間秩序形成

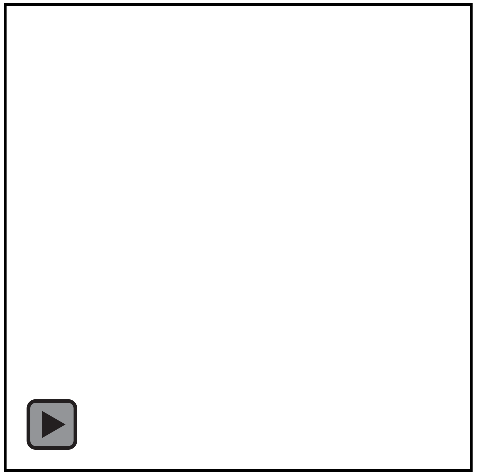
さまざまなリズム現象



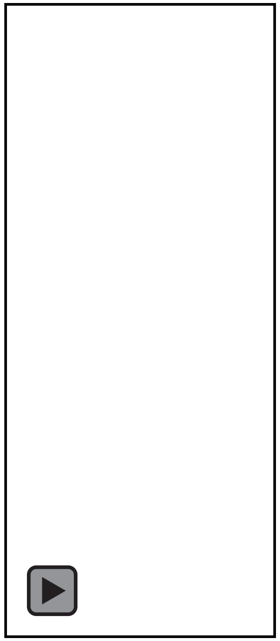
candle oscillator



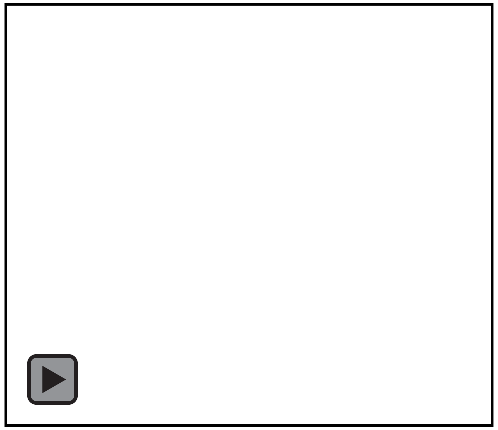
BR reaction



saline oscillator



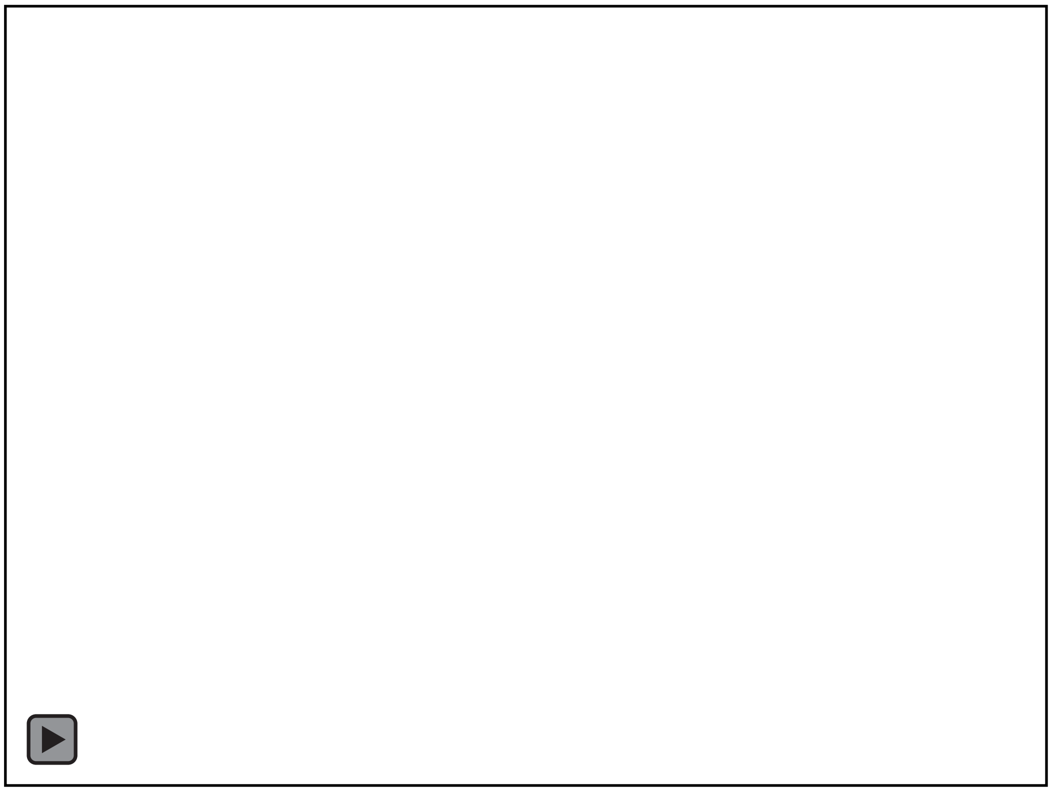
Plastic-bottle oscillator



water-camphor system

Belousov-Zhabotinsky (BZ)反応の実験

攪拌した系で



1 cm

空間勾配はなし

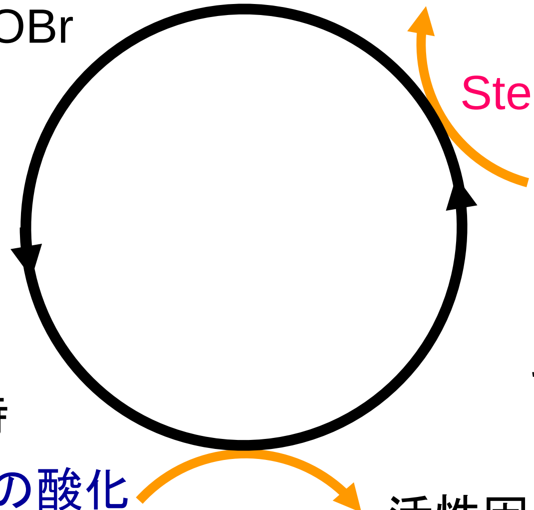
BZ反応のメカニズム

Step I. [Br $^-$]高の時

$Br^- + HBrO_2 \rightarrow 2HOBr$

([$HBrO_2$]と[Br^-]減)

抑制因子(Br^-)



Step III.

金属触媒の還元

（臭化マロン酸とマロン酸による）

マロン酸 ⟶ 臭化マロン酸

Step II. [Br $^-$]低の時

金属触媒の酸化

活性因子($HBrO_2$)を自己触媒的に生成

$\underline{HBrO_2} + BrO_3^-$

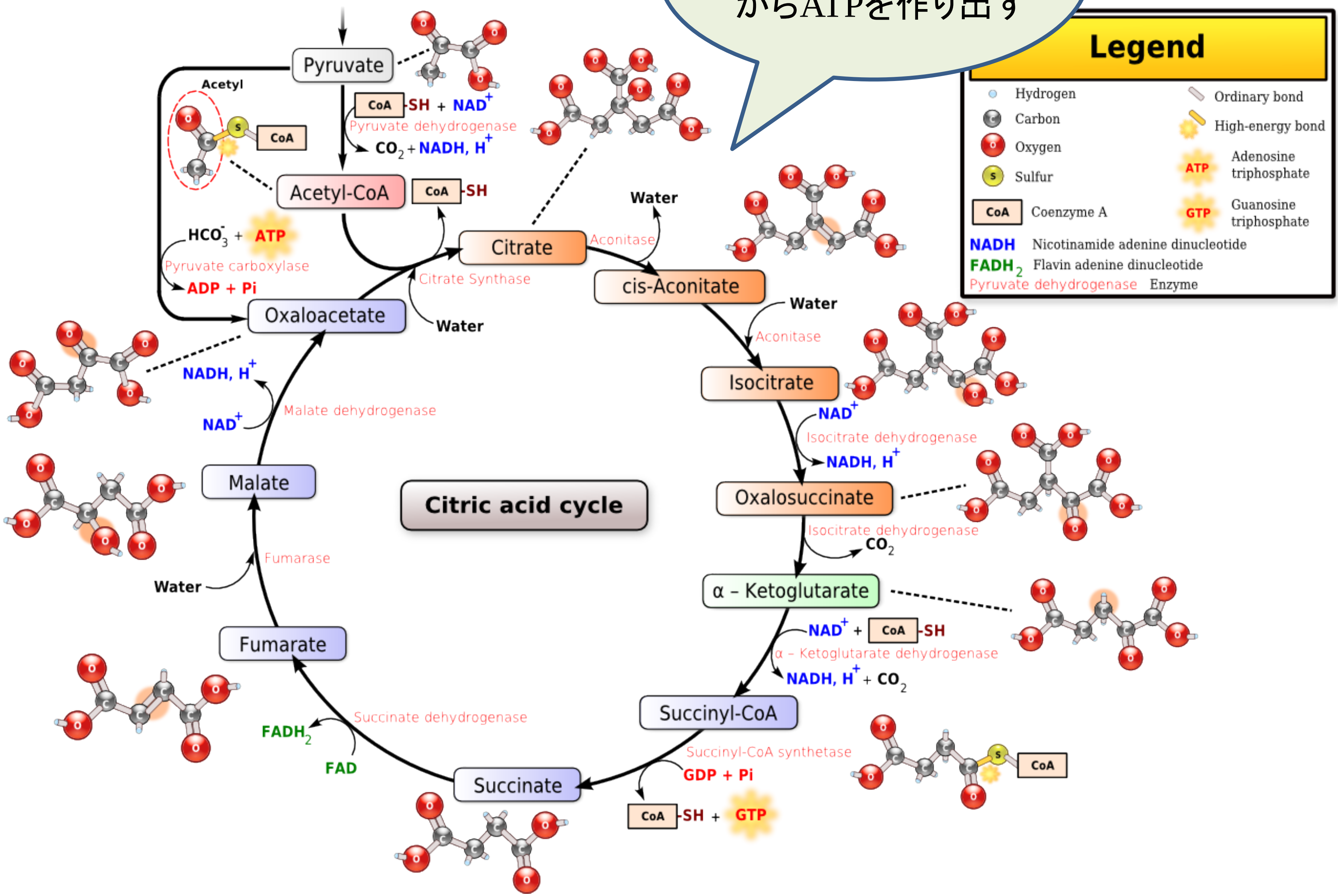
$+ 2[Fe(phen)_3]^{2+} + 3H^+$

$\rightarrow \underline{2HBrO_2} + 2[Fe(phen)_3]^{3+}$

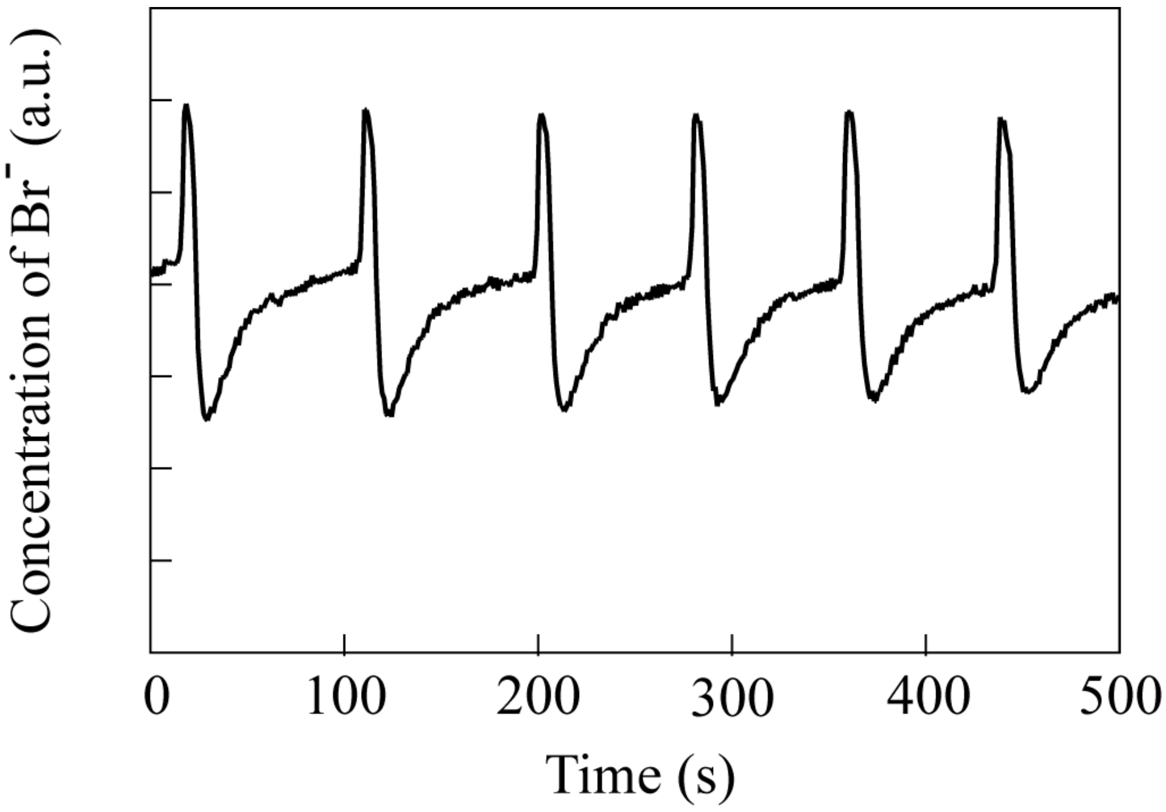
酸化反応　と　還元反応　が交互に起こる

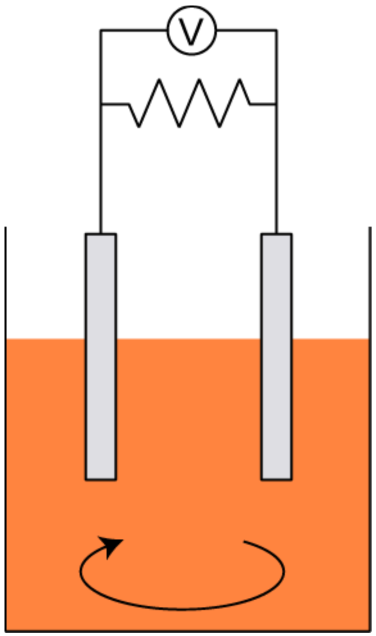
クエン酸回路

ブドウ糖
（正確にはピルビン酸）
からATPを作り出す



電極を用いた臭化物イオン（Br⁻）濃度の測定





BZ反応のモデル化

FKN Model　(R. J. Field, E. Körös, and R. M. Noyes, 1972).

化学反応の素過程から重要なものを抽出

(R1) $Br^- + HOBr + H^+ \rightleftarrows Br_2 + H_2O$

(R2) $Br^- + HBrO_2 + H^+ \rightleftarrows 2HOBr$

(R3) $Br^- + BrO_3^- + 2H^+ \rightleftarrows HOBr + HBrO_2$

(R4) $2HBrO_2 \rightleftarrows HOBr + BrO_3^- + H^+$

(R5) $HBrO_2 + BrO_3^- + H^+ \rightleftarrows 2BrO_2\cdot + H_2O$

(R6) $BrO_2\cdot + Ce^{3+} + H^+ \rightleftarrows HBrO_2 + Ce^{4+}$

(R7) $BrO_2\cdot + Ce^{4+} + H_2O \rightleftarrows BrO_3^- + Ce^{3+} + 2H^+$

(R8) $Br_2 + CH_2(COOH)_2 \rightarrow BrCH(COOH)_2 + Br^- + H^+$

(R9) $6Ce^{4+} + CH_2(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow 6Ce^{3+} + HCOOH + 3CO_2 + 6H^+$

(R10) $4Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow 4Ce^{3+} + HCOOH + Br^- + 2CO_2 + 5H^+$

3変数Oregonator (R. J. Field and R. M. Noyes, 1974).

(R3) $BrO_3^- + Br^- + 2H^+ \longrightarrow HBrO_2 + HOBr$

(R2) $HBrO_2 + Br^- + H^+ \longrightarrow 2HOBr$

(R5)+2(R6) $2Ce^{3+} + BrO_3^- + HBrO_2 + 3H^+ \longrightarrow 2Ce^{4+} + 2HBrO_2 + H_2O$

(R4) $2HBrO_2 \longrightarrow BrO_3^- + HOBr + H^+$

(R10) $4Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O \longrightarrow 4Ce^{3+} + HCOOH + Br^- + 2CO_2 + 5H^+$

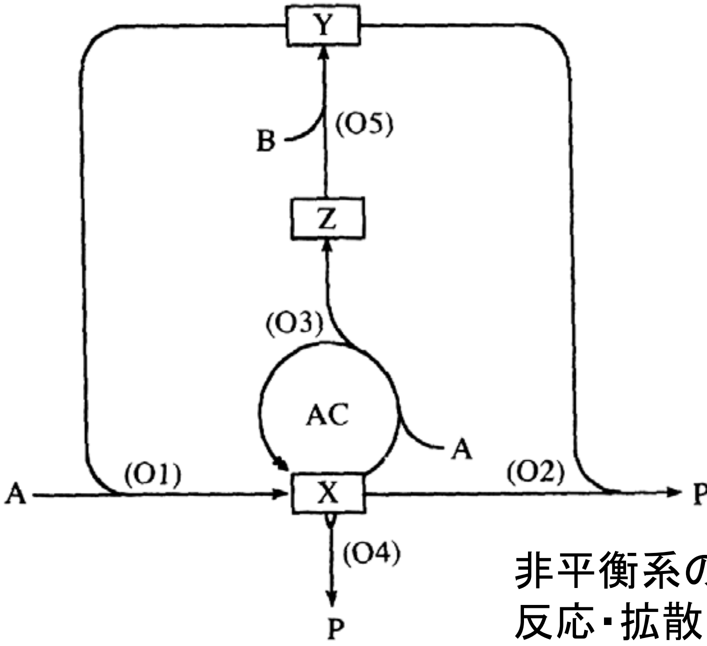
(O1) $A + Y \rightarrow X + P$

(O2) $X + Y \rightarrow 2P$

(O3) $A + X \rightarrow 2X + 2Z$

(O4) $2X \rightarrow A + P$

(O5) $Z + B \rightarrow hY$



非平衡系の科学III
反応・拡散系のダイナミクス
三池 秀敏ら 著

質量作用の法則より

$$\frac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = k_3 H^2 AY - k_2 HXY + k_5 HAX - 2k_4 X^2$$

$$\frac{\mathrm{d}Y}{\mathrm{d}t} = -k_3 H^2 AY - k_2 HXY + hk_j BZ$$

$$\frac{\mathrm{d}Z}{\mathrm{d}t} = -2k_5 HAX - k_j BZ$$

化学反応には、速い反応と遅い反応がある。

速い反応は、すぐに平衡に達すると考えて、
近似することができる。 ＝ 断熱消去

例: $\mathrm{L} \xrightarrow[\text{速}]{} \mathrm{M} \xrightarrow[\text{遅}]{} \mathrm{N}$

このとき、Nの濃度の時間変化はLの濃度のみによると
考えることができる。

化学反応の素過程

FKN Model (R. J. Field, E. Körös, and R. M. Noyes, 1972).

3変数Oregonator (R. J. Field and R. M. Noyes, 1974).

2変数Oregonator (J. J. Tyson and P. C. Fife, 1980).

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = f(U,V)$$

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = g(U,V)$$

$$f(U,V) = \frac{1}{\varepsilon}\left(U(1-U) - fV\frac{U-q}{U+q}\right)$$

$$g(U,V) = U - V$$

U : $[HBrO_2]$

V : $[Fe(phen)_3^{3+}]$

青色

2変数Oregonator

(J. J. Tyson and P. C. Fife, 1980).

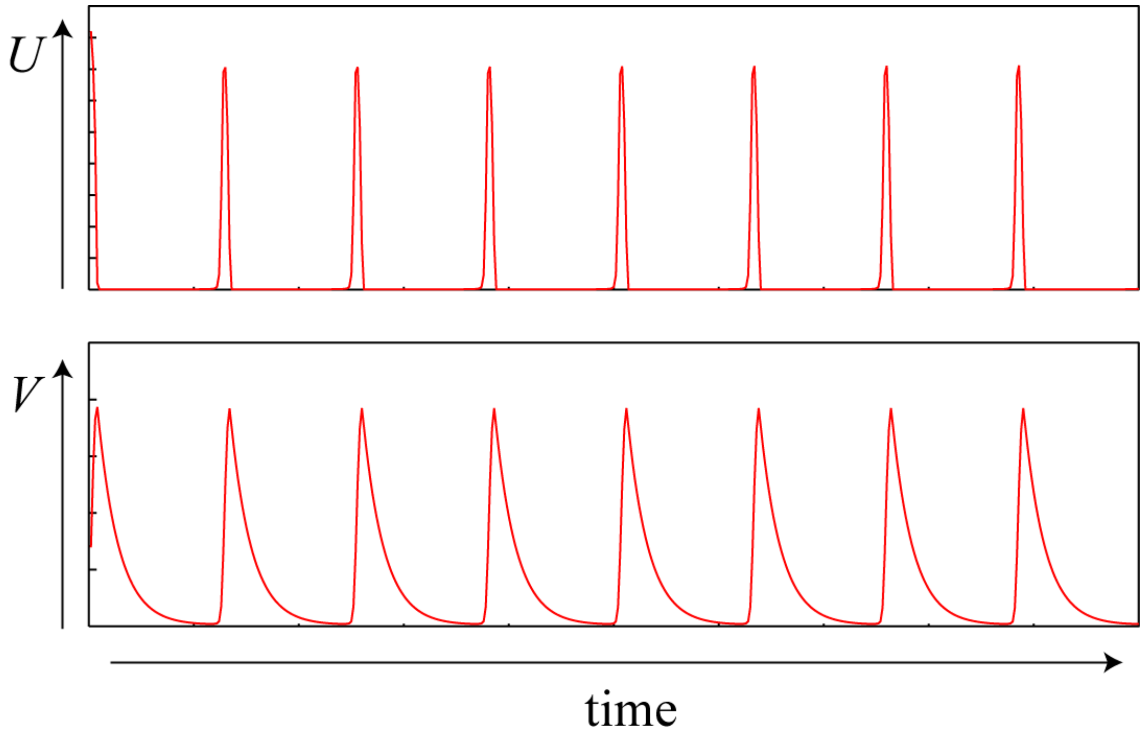
$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\varepsilon}\left(U(1-U) - fV\frac{U-q}{U+q} \right)$$

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = U - V$$

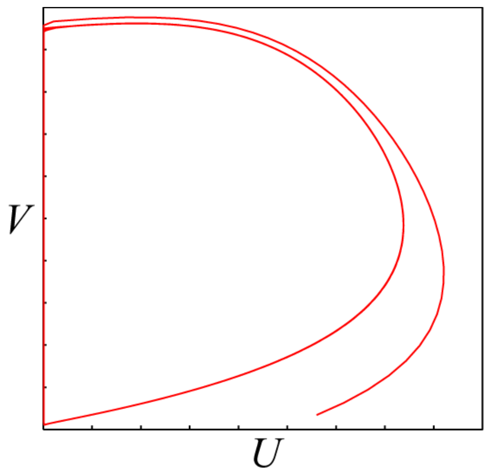
U : [$HBrO_2$]

V : [$Fe(phen)_3^{3+}$] 青色

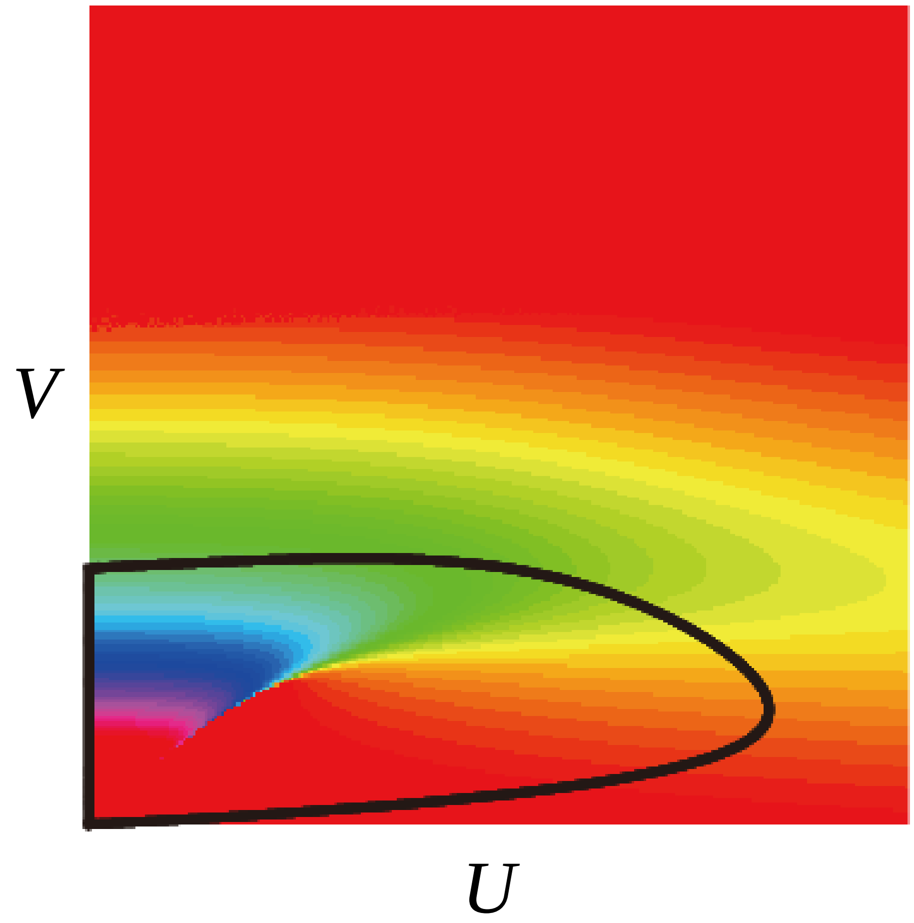
数値計算:



相平面で見ると

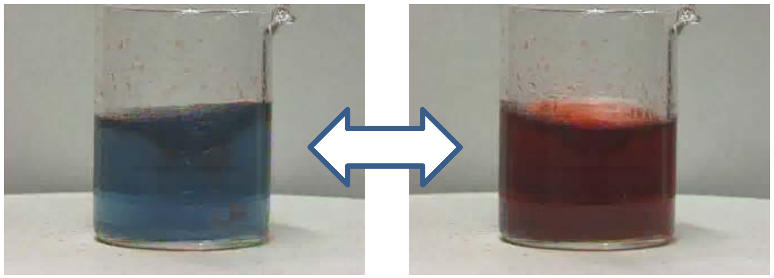


Oregonatorの等位相面



どちらもリミットサイクル振動なので、「位相」で考えられる。

具体(現象)から抽象(理論)へ



BZ反応

化学反応式
（物質に近いモデル）

(R1) $Br^- + HOBr + H^+ \rightleftharpoons Br_2 + H_2O$

(R2) $Br^- + HBrO_2 + H^+ \rightleftharpoons 2HOBr$

(R3) $Br^- + BrO_3^- + 2H^+ \rightleftharpoons HOBr + HBrO_2$

(R4) $2HBrO_2 \rightleftharpoons HOBr + BrO_3^- + H^+$

(R5) $HBrO_2 + BrO_3^- + H^+ \rightleftharpoons 2BrO_2\cdot + H_2O$

(R6) $BrO_2\cdot + Ce^{3+} + H^+ \rightleftharpoons HBrO_2 + Ce^{4+}$

(R7) $BrO_2\cdot + Ce^{4+} + H_2O \rightleftharpoons BrO_3^- + Ce^{3+} + 2H^+$

(R8) $Br_2 + CH_2(COOH)_2 \rightarrow BrCH(COOH)_2 + Br^- + H^+$

(R9) $6Ce^{4+} + CH_2(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow 6Ce^{3+} + HCOOH + 3CO_2 + 6H^+$

(R10) $4Ce^{4+} + BrCH(COOH)_2 + 2H_2O \rightarrow 4Ce^{3+} + HCOOH + Br^- + 2CO_2 + 5H^+$

Oregonator
（断熱近似・無次元化）

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = f(U,V)$$

$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}t} = g(U,V)$$

$$f(U,V) = \frac{1}{\varepsilon}\left(U(1-U) - fV\frac{U-q}{U+q}\right)$$

$$g(U,V) = U - V$$

U: $[HBrO_2]$

V: $[Fe(phen)_3^{3+}]$

青色

Stuart-Landau方程式
（位相記述・分岐理論）