

**研究タイトル：**

# 化学反応ネットワーク理論の拡張的研究と工学応用



氏名：	小松 弘和 / Komatsu Hirokazu	E-mail：	h-komatsu@toyota-ct.ac.jp
職名：	助教	学位：	博士(工学)
所属学会・協会：	日本数学会, 日本応用数理学会, 計測自動制御学会		
キーワード：	化学反応ネットワーク理論, 力学系, 制御工学		
技術相談 提供可能技術：	・数理的アプローチによる自然現象や社会現象に現れる様々な課題に対する 解決手法の提案		

## 研究内容： 化学反応ネットワーク理論の拡張と反応現象の予測や制御への応用

### ● 化学反応ネットワーク理論の拡張

多数の動的要素が相互作用によるネットワークを構成する「ネットワーク結合システム」は、非線形力学系とグラフ理論を融合した手法に基づいて活発に研究されている分野であり、情報通信ネットワークなどのダイナミクスの解析や制御への応用も期待される重要な研究課題である。化学反応ネットワーク(CRN)は、化学反応式の左右に現れる complex (反応物と生成物の総称) を頂点とし、反応の向きを示す矢印を有向辺とする有向グラフによって表現されるネットワーク結合システムである。CRN に対して、ネットワークの幾何学的な性質からダイナミクスを解析する「化学反応ネットワーク理論(CRNT)」がある。この理論は、CRN のダイナミクスを記述する常微分方程式(ODE)を直接解析することなく、ネットワーク構造のみから定性的なダイナミクスを明らかにする手段を提供している。しかし、生化学や化学工学などでみられるように、現在の CRNT では解析できない CRN も現実には多い。さらに、空間構造を考慮する場合や反応間に時間遅れが存在する場合、数理モデルとして常微分方程式の有限次元系ではなく、偏微分方程式(PDE)や遅れ型微分差分方程式(DDE)の無限次元系が適切である。本研究では、CRNT を拡張し、無限次元系でダイナミクスを記述すべき系を含む、CRN のより広いクラスに適用可能な理論に発展させることを目指している。

### ● 化学反応ネットワーク理論の工学応用

生化学や化学工学に生じる反応現象の予測や制御といった現実的な課題の解決へ CRNT の応用を目指している。また、CRNT は、CRN のみを対象としているが、化学物質の具体的な性質には依存せず、システムのダイナミクスを力学系とグラフ理論のみを用いて解析する手法である。したがって、CRNT は、一般のネットワーク結合システムの解析にも適用可能である考えられる。本研究では、情報通信ネットワークなどのネットワーク結合システムの解析や制御へ CRNT の応用も検討する。

### 提供可能な設備・機器：

名称・型番(メーカー)	