

薬学情報処理演習 第3回

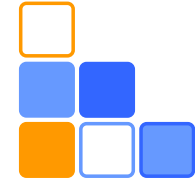
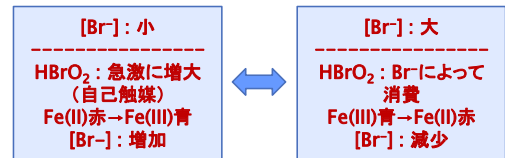
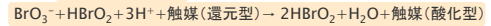
非線形化学振動反応のシミュレーション

奥 蘭 透
コロイド・高分子物性学

リズムを生み出す化学反応

□ ペロロフ・ジャボチンスキー反応 (BZ反応)

- マロン酸、臭素酸カリウム、臭化カリウム、硫酸+触媒 (フェロイン)
- 酸化還元反応の繰り返しが発生的におこる。
- 自己触媒の過程+フィードバック ⇒ 振動



1

2



BZ反応のモデル

□ Oregonator (simplified)

$$\epsilon \frac{du}{dt} = u(1-u) - \frac{bv(u-c)}{u+c}$$

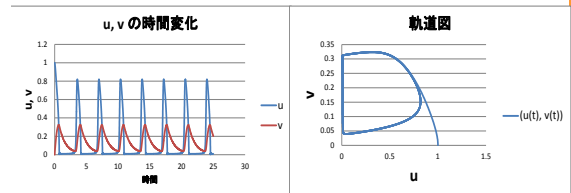
$$\frac{dv}{dt} = u - v$$

- u, v はそれぞれ HBrO_2 , Fe(III) の濃度に対応
- t は無次元化された時間
- ϵ, b, c は定数



数値シミュレーション

- 前回と同様の手法でシミュレーションを行う。
- いろいろなパラメータや初期値に対して計算する。



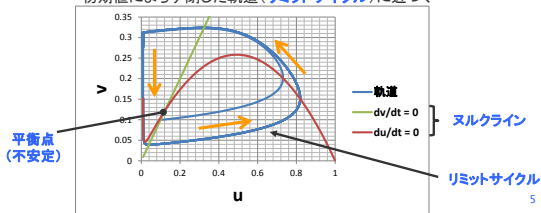
3

4



振動の特徴

- 平衡点の安定性
 - 平衡点: $du/dt = dv/dt = 0$ となる (u, v)
 - 時間とともに平衡点に近づく: 安定、遠ざかる: 不安定
- リミットサイクル振動
 - 初期値によらず閉じた軌道 (リミットサイクル) に近づく



5



演習課題

- 以下のパラメータを用いてオレゴネーターによるシミュレーションを行い、 $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフを軌道図を描く。軌道図にはヌルラインも入れる。
 $\epsilon = 0.04, b = 1, c = 0.008$
- リミットサイクル振動でない場合の $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフおよび軌道図を描く。用いたパラメータの値も記す。
- 上記の課題をレポートとしてA4用紙1枚にまとめ、学籍番号、氏名 (自筆) を明記してこの時間内に提出。

6