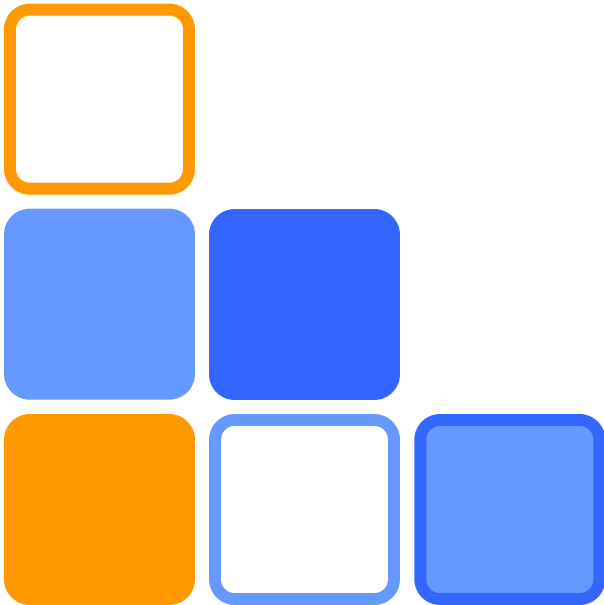


薬学情報処理演習 第3回

非線形化学振動反応の シミュレーション

奥菌 透

コロイド・高分子物性学

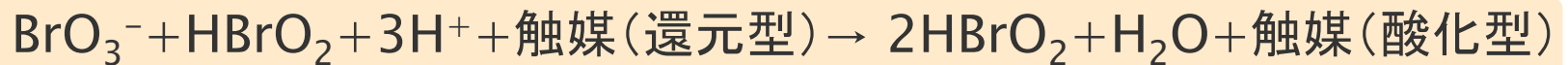




リズムを生み出す化学反応

□ ベロゾフ・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自発的に起こる。
- 自己触媒的過程 + フィードバック $\Rightarrow$ 振動



[Br⁻] : 小

**HBrO₂ : 急激に増大
(自己触媒)**

Fe(II)赤 $\rightarrow$ Fe(III)青

[Br⁻] : 増加



[Br⁻] : 大

**HBrO₂ : Br⁻によって
消費**

Fe(III)青 $\rightarrow$ Fe(II)赤

[Br⁻] : 減少



BZ反応のモデル

□ Oregonator (simplified)

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

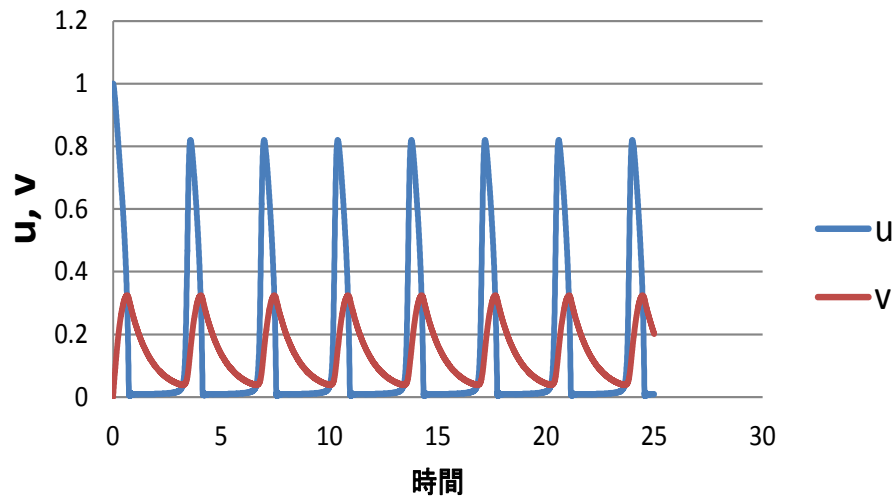
$$\frac{dv}{dt} = u - v$$

- 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

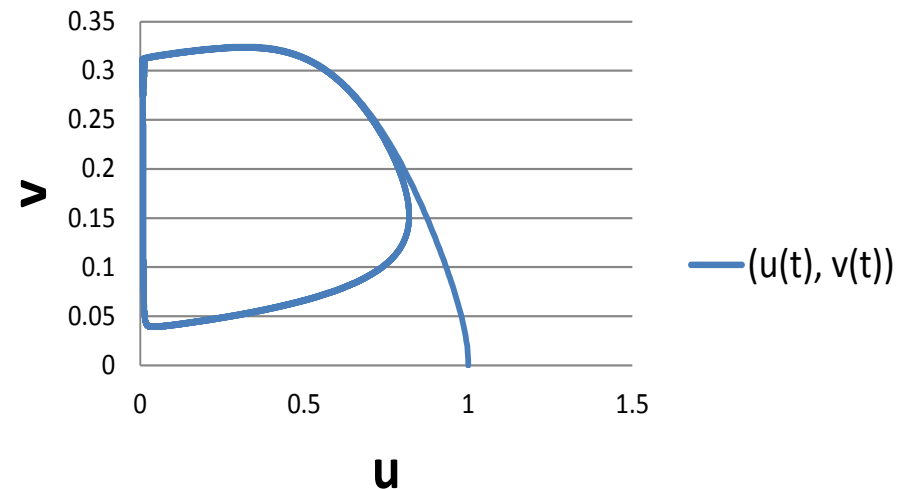
数値シミュレーション

- 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。

u, v の時間変化



軌道図



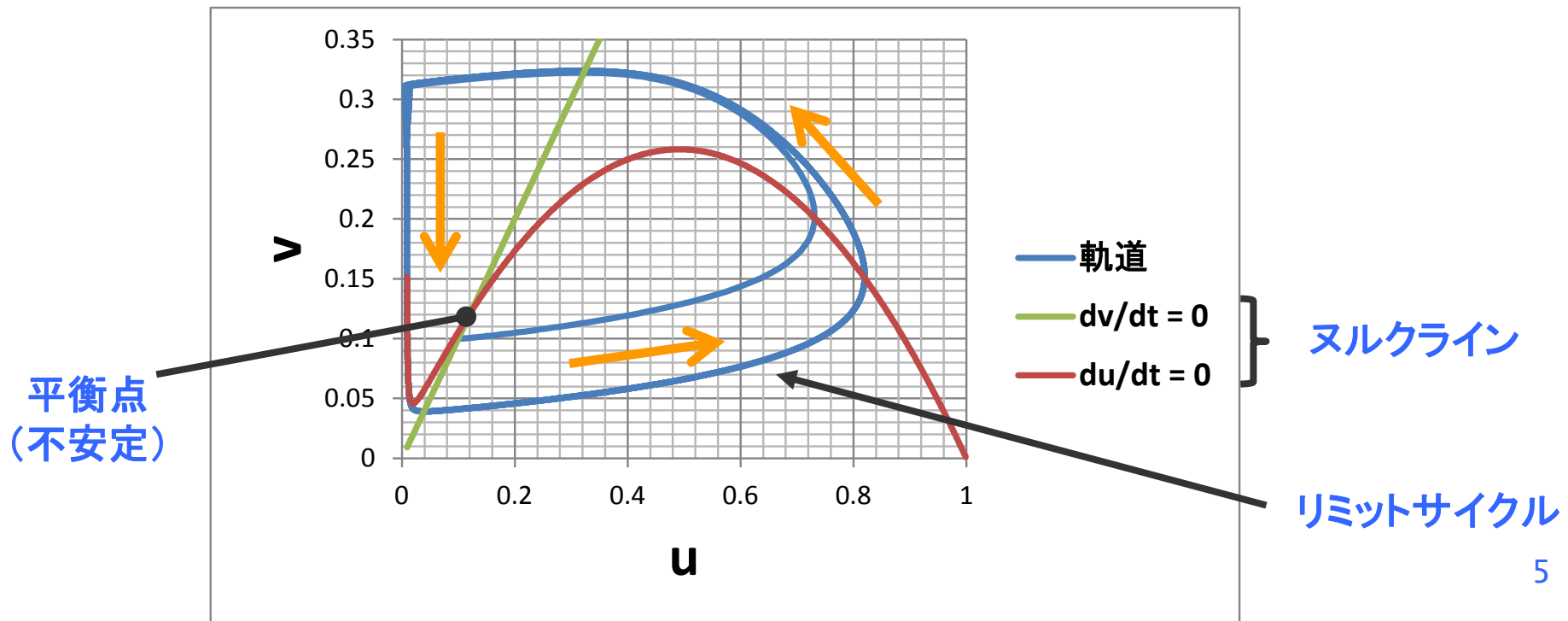
振動の特徴

□ 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





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。軌道図にはヌルクラインも入れる。
$$\epsilon = 0.04, b = 1, c = 0.008$$
- 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。