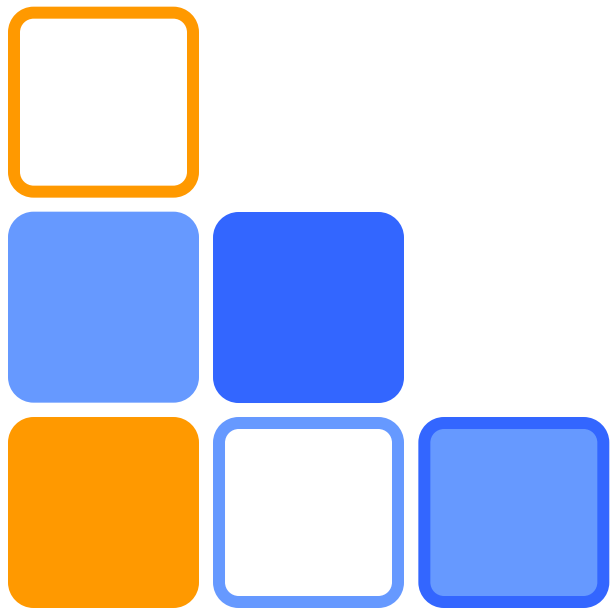


薬学情報処理演習 第5回

非線形化学振動反応の シミュレーション

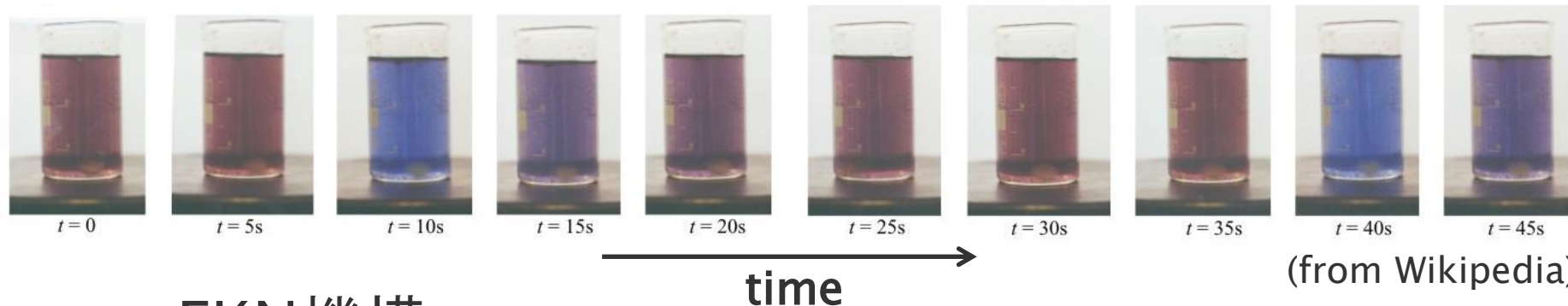
奥菌 透

コロイド・高分子物性学



化学振動反応

ベローゾフ・ジャボチンスキー反応 (BZ反応)



FKN機構

振動に関する反応



10個の反応式

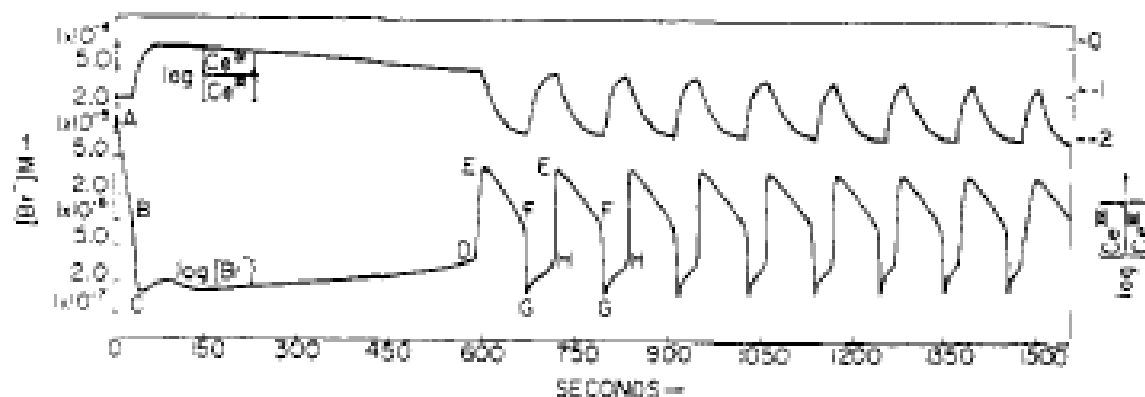


Figure 1. Potentiometric traces of $\log [\text{Br}^-]$ and $\log [\text{Ce(IV)}]/[\text{Ce(III)}]$ for a representative reaction exhibiting all six periods. Initial concentrations were $[\text{CH}_2(\text{COOH})_2]_0 = 0.032 \text{ M}$, $[\text{KBrO}_3]_0 = 0.063 \text{ M}$, $[\text{KBr}]_0 = 1.5 \times 10^{-3} \text{ M}$, $[\text{Ce}(\text{NH}_4)_2(\text{NO}_3)_6]_0 = 0.001 \text{ M}$, $[\text{H}_2\text{SO}_4]_0 = 0.8 \text{ M}$.

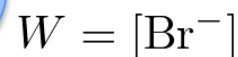
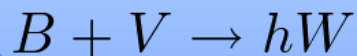
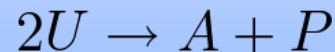
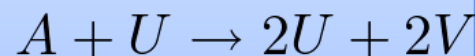
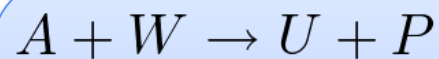


BZ反応のモデル

□ オレゴネーター

- 10以上の反応式
- ➡ 5つの反応式

□ 2変数モデル(タイソン)



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

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

$$\epsilon \simeq 10^{-2}$$

$$b \simeq 1$$

$$c \simeq 8 \times 10^{-4}$$

- u, v はそれぞれ $\text{HBrO}_2, \text{Ce}^{4+}$ の濃度に対応
- t は無次元化された時間、 ϵ, b, c は定数
(時間スケール~50 sec)

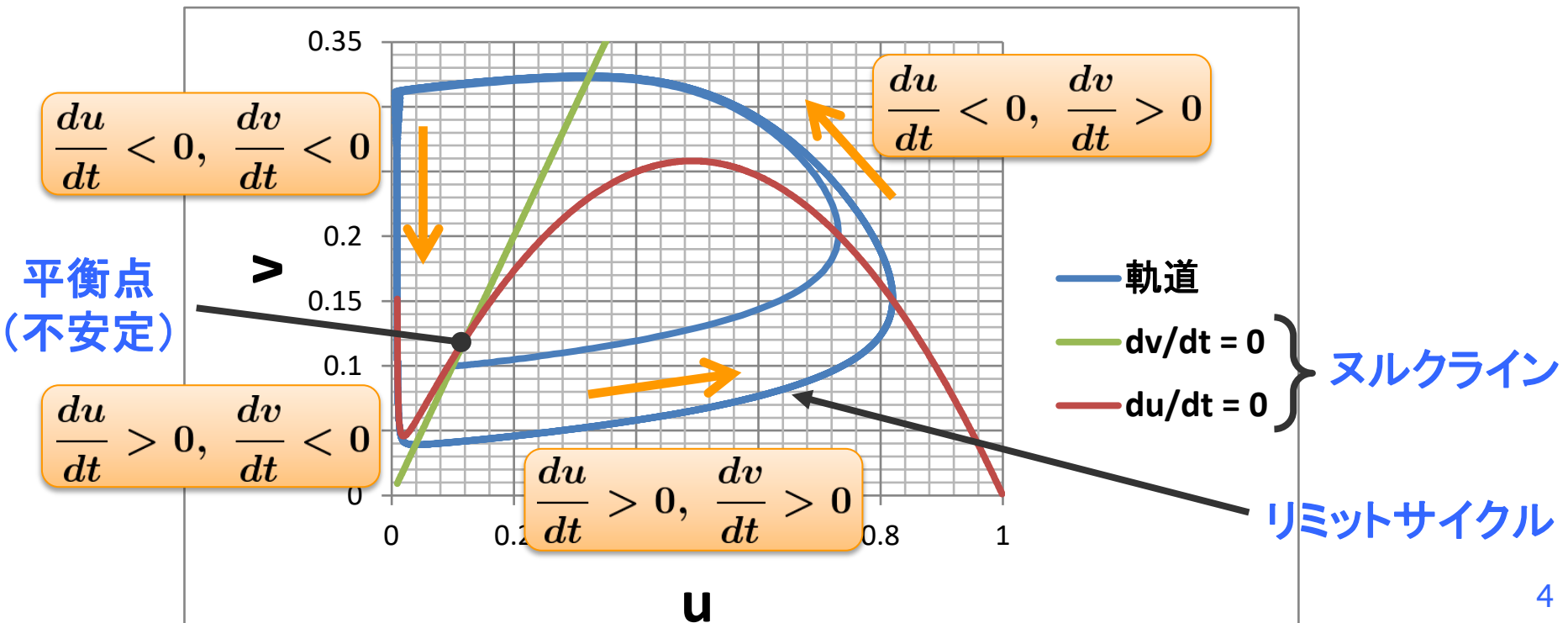
振動の特徴

□ 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

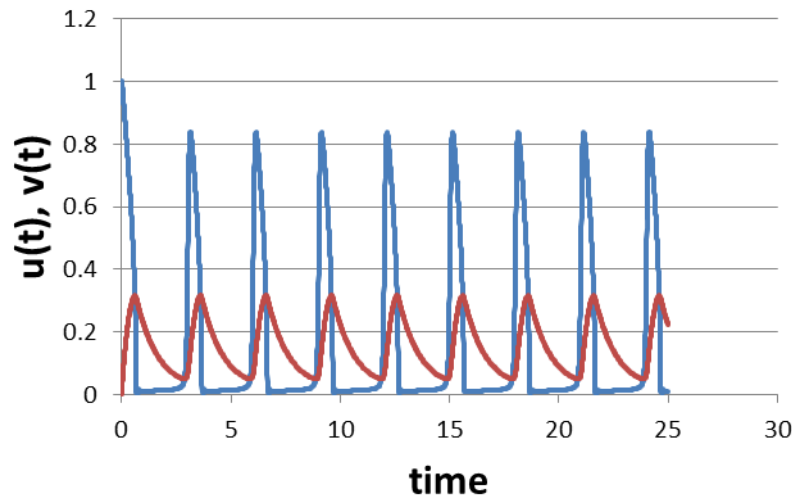
- 初期値によらず閉じた軌道(**リミットサイクル**)に近づく



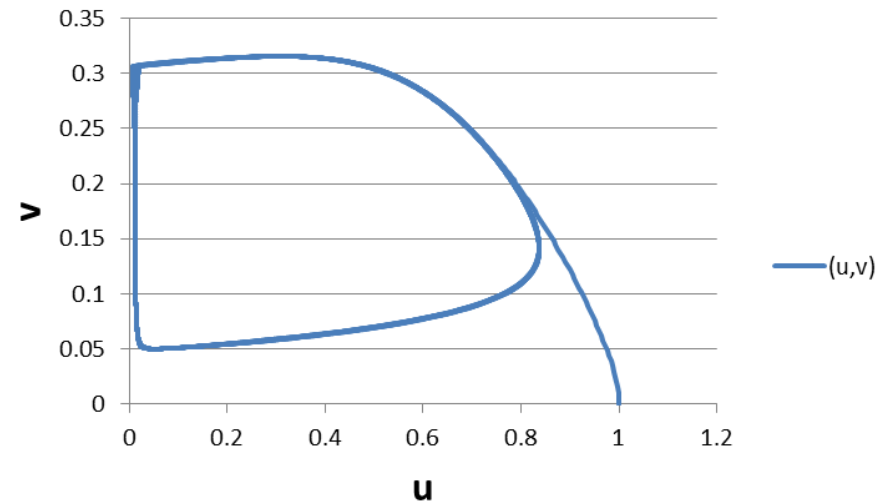
数値シミュレーション

- 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



パラメータ: $\epsilon=0.03$, $b=1$, $c=0.01$, $\Delta t=0.005$
初期値: $u=1$, $v=0$



数値スキーム

□ モデル方程式

$$\frac{du}{dt} = f(u, v)$$

$$\frac{dv}{dt} = g(u, v)$$

$$f(u, v) = \frac{1}{\epsilon} \left[u(1 - u) - \frac{bv(u - c)}{u + c} \right]$$

$$g(u, v) = u - v$$

□ オイラー差分法

$$(u_n, v_n) = (u(t_n), v(t_n)) \quad t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

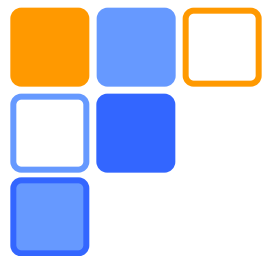
$$u_{n+1} = u_n + f(u_n, v_n)\Delta t$$

$$v_{n+1} = v_n + g(u_n, v_n)\Delta t$$



演習課題

- オレゴネーター(2変数モデル)によるシミュレーションを行い、リミットサイクル振動するばあいについて $u(t)$, $v(t)$ の時間変化のグラフと軌道図を描く。初期値を変えて行い、同じリミットサイクルに近づくことを確かめる。
- 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。



参考図書

- 吉川研一「非線形科学—分子集合体のリズムとカタチ—」(学会出版センター, 1992)
- 太田隆夫「非平衡系の物理学」(裳華房, 2000)
- Shuichi Kinoshita, “Pattern Formations and Oscillatory Phenomena,” (Elsevier, 2013)